Numerička analiza

9. predavanje

Autori: Sanja Singer i Nela Bosner
Predavač: Nela Bosner

nela@math.hr
web.math.hr/~nela/nad.html

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Svojstveni problem i kanonske forme:
  - Trokutaste i blok-trokutaste forme.
  - Sličnosti matrica, Jordanova forma i dijagonalizabilne matrice.
  - Unitarna sličnost, Schurova i realna Schurova forma.
- Svođenje na Hessenbergovu i tridijagonalnu formu:
  - Numeričko računanje Schurove forme
  - Računanje Hessenbergove forme
- Osnovni QR algoritam bez i sa pomacima
- Nesimetrični QR algoritam:
  - Svojstva Hessenbergove forme
  - "Gonjenje izbočine" za jednostruki pomak
  - "Gonjenje izbočine" za dvostruki pomak

Svojstveni problem i kanonske forme

Svojstvene vrijednosti

Prvo uvedimo malo netipičnu definiciju svojstvenih vrijednosti matrice, koja ne uključuje svojstvene vektore.

Definicija. Neka je A kvadratna matrica reda n. Polinom

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I)$$

zove se karakteristični polinom matrice A.

Nultočke (korijeni karakterističnog polinoma) su svojstvene vrijednosti matrice A.

Standardna definicija uključuje samo desne svojstvene vektore, dok ova definicija omogućava i definiciju lijevih svojstvenih vektora.

Svojstveni vektori

Sad možemo definirati i svojstvene vektore.

Definicija. Vektor $x \neq 0$ koji zadovoljava

$$Ax = \lambda x$$

je desni svojstveni vektor matrice A za svojstvenu vrijednost λ, a vektor $y \neq 0$ koji zadovoljava

$$y^* A = \lambda y^*$$

je lijevi svojstveni vektor matrice A za svojstvenu vrijednost λ.

Ove definicije nisu u suprotnosti sa standardnom definicijom.

Standardna definicija

Standardna definicija. Za par (λ, x), reći ćemo da je svojstveni par (tj. x je svojstveni vektor, a λ je svojstvena vrijednost) matrice A ako vrijedi

$$Ax = \lambda x, \quad x \neq 0.$$

Jednostavnim prebacivanjem desne strane na lijevu dobivamo

$$(A - \lambda I)x = 0,$$

pa će taj linearni sustav imati netrivijalno rješenje x, ako i samo ako je matrica sustava singularna, što možemo provjeriti računanjem determinante.

Još malo o svojstvenim vrijednostima

Uočimo neke činjenice vezane uz svojstvene vrijednosti:

- svaka matrica A reda n ima točno n svojstvenih vrijednosti (osnovni teorem algebre);
- realna matrica može imati kompleksne svojstvene vrijednosti i takve uvijek dolaze u konjugirano-kompleksnim parovima.

Primjer. Matrica

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

je realna, ali su njezine svojstvene vrijednosti $\pm i$.

Desni i lijevi svojstveni vektori mogu biti jednaki. Na primjer, jednaki su za hermitske matrice.

Kako računati svojstvene vrijednosti i vektore?

Iz uvodnih definicija nije jasno kako treba računati svojstvene vrijednosti, ni svojstvene vektore.

- Naizgled jednostavno rješenje je rješavanje nelinearne jednadžbe

  $$p(\lambda) = 0.$$

  Međutim to se nikad tako ne radi, jer umjesto realnih svojstvenih vrijednosti možemo dobiti kompleksne.

Primjer. Pokušajte numerički izračunati nultočke polinoma

$$p(x) = (x - 1) \cdot (x - 2) \cdots (x - 19) \cdot (x - 20),$$

napisanoga po potencijama od x.

“Dobre” forme

Postavlja se pitanje u koju formu treba dovesti matricu A da joj lako pročitamo svojstvene vrijednosti.

Najjednostavnija forma je dijagonalna forma, ali ne mogu se sve matrice dijagonalizirati. Na primjer, matrica

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

sigurno se ne može dijagonalizirati, jer bi njezina dijagonalna forma trebala biti

$$\Lambda = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

“Dobre” forme (nastavak)

Ipak i matrica A je u “dobroj formi”!

- Svojstvene vrijednosti trokutastih matrica pišu na dijagonali!

Ideja. Treba pronaći transformacije, koje općenitu matricu

- dovode u trokutastu formu,
- ne mijenjaju joj svojstvene vrijednosti.

Čak ni to nije dovoljno za “sreću”:

- Ako matrica ima kompleksnih svojstvenih vrijednosti, one će morati pisati na njezinoj dijagonali.
- Moramo koristiti kompleksne transformacije za realne matrice!

Blok-gornjetrokutasta forma

Umjesto trokutaste forme, matrica se može dovesti i na realnu blok-gornjetrokutastu formu koja ima

- 1×1 blokove na dijagonali za realne svojstvene vrijednosti,
- 2×2 blokove na dijagonali za konjugirano-kompleksne parove svojstvenih vrijednosti.

Takva blok-gornjetrokutasta matrica izgleda ovako:

$$T = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1b} \\ & A_{22} & \cdots & A_{2b} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & A_{bb} \end{bmatrix}.$$

Sličnosti

Determinanta blok-gornjetrokutaste matrice T je

$$\det(T - \lambda I) = \prod_{k=1}^{b} \det(A_{kk} - \lambda I),$$

pa smo izbjegli korištenje kompleksne aritmetike.

Osnovne transformacije kojima se matrice dovode na takve kanonske forme su sličnosti.

Definicija: Neka je S proizvoljna regularna matrica, a A i B su takve da vrijedi

$$B = S^{-1}AS.$$

Matrice A i B zovemo sličnim matricama, a S sličnošću.

Svojstva sličnosti

Propozicija. Ako su matrice A i B slične, tj. ako je

$$B = S^{-1}AS,$$

matrice A i B imaju jednake svojstvene vrijednosti.

Vektor x je desni svojstveni vektor matrice A, ako i samo ako je $S^{-1}x$ desni svojstveni vektor matrice B.

Nadalje, y je lijevi svojstveni vektor matrice A, ako i samo ako je S^*y lijevi svojstveni vektor matrice B.

Svojstva sličnosti

Dokaz. Za kvadratne matrice vrijedi Binet–Cauchyjev teorem

$$\det(X \cdot Y) = \det X \cdot \det Y,$$

pa imamo

$$\begin{aligned}\det(B - \lambda I) &= \det(S^{-1}AS - \lambda S^{-1}S) \\ &= \det(S^{-1}(A - \lambda I)S) \\ &= \det(S^{-1}) \det(A - \lambda I) \det S \\ &= \det(A - \lambda I).\end{aligned}$$

Time smo pokazali da A i B imaju isti svojstveni polinom, pa im i svojstvene vrijednosti moraju biti jednake.

Svojstva sličnosti

Pokažimo još i vezu svojstvenih vekora. Ako je

$$Ax = \lambda x,$$

onda iz $B = S^{-1}AS$ izlazi da je $A = SBS^{-1}$, pa mora vrijediti

$$SBS^{-1}x = \lambda x.$$

Množenjem prethodne relacije slijeva sa S^{-1}, dobivamo

$$B(S^{-1}x) = \lambda(S^{-1}x).$$

Čitanjem "natraške" dobivamo i drugu implikaciju.

Za lijeve svojstvene vektore rezultat se dobiva na sličan način.

Svojstva sličnosti

Neka je

$$y^* A = \lambda y^*.$$

Tada je

$$y^* S B S^{-1} = \lambda y^*.$$

Množenjem zdesna sa S dobivamo

$$(y^* S) B = \lambda (y^* S),$$

pa zaključujemo da je $S^* y$ lijevi svojstveni vektor za B.

Obratnim čitanjem dobijemo drugi smjer dokaza. $\blacksquare$

Vrijedi li obrat?

Problem. Jesu li matrice koje imaju iste svojstvene vrijednosti slične, tj. vrijedi li na neki način obrat gornjeg teorema?

Obrat ne vrijedi! Na primjer, matrice

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{i} \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

imaju dvostruku svojstvenu vrijednost 1.

- A ima samo jedan desni svojstveni vektor e_1 i samo jedan lijevi svojstveni vektor e_2.
- B ima dva desna (e_1 i e_2) i dva lijeva svojstvena vektora (e_1 i e_2).

Zaključak. Matrice A i B ne mogu biti slične.

Jordanova forma

Jedan od osnovnih teorema koji daje kanonsku strukturu matrice je Jordanov teorem, koji, gotovo u potpunosti,

- karakterizira formu matrice najbližu dijagonalnoj,

za matrice koje se ne mogu dijagonalizirati.

Teorem (Jordanova forma). Neka je A kvadratna matrica reda n. Tada postoji regularna matrica S, takva da je

$$S^{-1}AS = J,$$

pri čemu je J tzv. Jordanova forma, tj. J je blok-dijagonalna,

$$J = \mathrm{diag}(\, J_{n_1}(\lambda_1),\, J_{n_2}(\lambda_2),\, \ldots,\, J_{n_k}(\lambda_k)\,),$$

gdje je $J_{n_i}(\lambda_i)$ matrica reda n_i, ...

Jordanova forma (nastavak)

... oblika

$$J_{n_i}(\lambda_i) = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & & \\ & \lambda_i & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_i & 1 \\ & & & & \lambda_i \end{bmatrix}.$$

Matrica J je jedinstvena, do na permutaciju dijagonalnih blokova.

Svaki J_{n_i} zove se Jordanov blok i njegova svojstvena vrijednost λ_i ima algebarsku kratnost n_i.

Zbroj svih redova n_i za iste vrijednosti λ_i zove se algebarska kratnost svojstvene vrijednosti $\lambda = \lambda_i$.

Dijagonalizibilnost, defektne matrice, . . .

Navedimo još neke činjenice koje proizlaze iz Jordanove forme.

- Ako je $n_i = 1$ i λ_i se pojavljuje u samo jednom bloku, onda je λ_i jednostruka svojstvena vrijednost.
- Ako su sve svojstvene vrijednosti u matrici J jednostruke, onda je J dijagonalna, tj. A se može dijagonalizirati.
- Ako postoji barem jedan blok J_{n_i} reda barem 2, A je defektna matrica.
- Bitno svojstvo defektnih matrica je da nemaju punu bazu svojstvenih vektora.
- Broj svojstvenih vektora za svojstvenu vrijednost λ zove se geometrijska kratnost svojstvene vrijednosti.

Koje se matrice mogu dijagonalizirati?

Ipak, mnoge se matrice mogu dijagonalizirati.

Posljedica Jordanovog teorema je da se sigurno mogu dijagonalizirati

- matrice koje imaju samo različite svojstvene vrijednosti.

Nadalje, postoje i matrice, koje možda imaju iste svojstvene vrijednosti, a još uvijek se mogu dijagonalizirati.

- Najšira klasa takvih matrica su normalne matrice, tj. matrice za koje vrijedi

$$N^*N = NN^*.$$

Primjer

Za matricu

$$A = \begin{bmatrix} \frac{7}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{5}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{5}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{11}{4} & \frac{1}{4} \\ -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{7}{2} \end{bmatrix}$$

su . . .

Primjer (nastavak)

... matrice J i S jednake

$$J = \left[\begin{array}{cc|ccc|c} 2 & 1 & & & & \\ & 2 & & & & \\ \hline & & 3 & 1 & & \\ & & & 3 & 1 & \\ & & & & 3 & \\ \hline & & & & & 2 \end{array}\right], \quad S = \begin{bmatrix} 1 & & & & & 1 \\ & 1 & & & & 1 \\ & & 1 & & & 1 \\ & & & 1 & & 1 \\ & & & & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Primijetite da 2 nije jednostruka, nego trostruka svojstvena vrijednost matrice A.

Puna baza svojstvenih vektora

Propozicija. Jordanov blok $J_{n_i}(\lambda_i)$ ima

- samo jedan desni svojstveni vektor, i to je e_1,
- i samo jedan lijevi svojstveni vektor, i to je e_{n_i}.

Dokaz se provodi računanjem x iz

$$(J_{n_i}(\lambda_i) - \lambda I)x = 0$$

za desni svojstveni vektor. Na sličan način se dobije i za lijevi svojstveni vektor. ∎

Prema prethodnoj propoziciji odmah slijedi da se, čim postoji Jordanov blok veličine barem 2, matrica ne može dijagonalizirati!

Jordanova forma — da ili ne?

Ipak, Jordanova forma je nekorisna u numeričkom računanju.

- Neka je $J_n(0)$ Jordanov blok reda n za svojstvenu vrijednost 0,

$$J_n(0) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 \\ & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Ako, za $i = 1, \ldots, n$, na i-tom mjestu na dijagonali dodamo $i \cdot \varepsilon$, pri čemu je $0 < \varepsilon \ll 1$, onda smo tom malom perturbacijom potpuno promijenili karakter matrice.

Jordanova forma — da ili ne? (nastavak)

- Umjesto $J_n(0)$, imamo

$$\hat{J}_n(0) = J_n(0) + \Delta J_n(0) = \begin{bmatrix} \varepsilon & 1 & & & \\ & 2\varepsilon & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & (n-1)\varepsilon & 1 \\ & & & & n\varepsilon \end{bmatrix}.$$

Jordanova forma te malo perturbirane matrice je dijagonalna,

$$\hat{J}_n(0) = \mathrm{diag}(\,\varepsilon,\, 2\varepsilon,\, \ldots,\, (n-1)\varepsilon,\, n\varepsilon\,).$$

- Zašto?

Jordanova forma — da ili ne? (nastavak)

Drugi razlog što se ne koristi Jordanova forma je:

- ona se ne može stabilno izračunati, tj. kad završimo s računanjem S i J, ne može se garantirati da vrijedi

$$S^{-1}(A + \Delta A)S = J$$

  za neki mali ΔA.

Umjesto Jordanove forme, u numeričkom se računanju koristi Schurova forma. Glavno svojstvo:

- Umjesto regularne matrice S, koja može biti proizvoljno loše uvjetovana,
- koristi se unitarna matrica Q, samo dobivena forma više nije kompaktna.

Schurova forma

Teorem. 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

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

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.

Schurova forma (nastavak)

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 $\mathbb{C}^n$.

Schurova forma (nastavak)

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

$$U_1^* A U_1 = \begin{bmatrix} u_1^* \\ V_2^* \end{bmatrix} [\ Au_1 \quad AV_2\ ] = \begin{bmatrix} u_1^* \\ V_2^* \end{bmatrix} [\ \lambda_1 u_1 \quad AV_2\ ]$$

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

- 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.

Schurova forma (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 $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$ 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
$$U^*U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2^* \end{bmatrix} U_1^* U_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2^* U_2 \end{bmatrix} = I_n,$$

Schurova forma (nastavak)

pa je U unitarna matrica sa svojstvom

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

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & u_1^* A V_2 \\ 0 & A_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \lambda_1 & u_1^* A V_2 U_2 \\ 0 & U_2^* A_2 U_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & u_1^* A V_2 U_2 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \lambda_1 & & u_1^* A V_2 U_2 & & \\ 0 & \lambda_2 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \cdots & * \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & * \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} = T$$

Schurova forma (nastavak)

Napomena.

- Uočimo da Schurova forma nije jedinstvena, jer svojstvene vrijednosti se na dijagonali mogu pojaviti u bilo kojem poretku.
- 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.

Schurova forma normalnih matrica

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 $|\lambda_i| = 1,\ i = 1, \ldots, n$.

Schurova forma normalnih matrica (nastavak)

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

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

Schurova forma normalnih matrica (nastavak)

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

Baza $n = 1$ pa je tvrnja 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.

Schurova forma normalnih matrica (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

Schurova forma normalnih matrica (nastavak)

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

Višestruke svojstvene vrijednosti

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.

Višestruke svojstvene vrijednosti (nastavak)

Primjer. Neka je

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

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.

Višestruke svojstvene vrijednosti (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.

Matrice s jednostrukim svojst. vrijednostima

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.

Matrice s jednostrukim svojst. vrijednostima

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 $\tilde{t}_{jj}$.

Matrice s jednostrukim svojst. vrijednostima

- 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

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

- Ako definiramo $\tilde{A} = U\tilde{T}U^*$, onda $\tilde{A}$ ima n međusobno različitih svojstvenih vrijednosti i $\|A - \tilde{A}\|_F = \|T - \tilde{T}\|_F < \varepsilon$.

Matrice s jednostrukim svojst. vrijednostima

- 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).
  - U tom slučaju biramo realne (imaginarne) δ_j.

Matrice s jednostrukim svojst. vrijednostima

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

Realna Schurova forma

- Nadalje, Schurova forma može voditi na kompleksnu gornjetrokutastu matricu T, čak i onda kad je A realna.
- U primjenama se vrlo često koriste realne matrice koje općenito imaju kompleksne svojstvene vrijednosti, ali se često očekuje da svojstvene potprostori 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.

Realna Schurova forma (nastavak)

- 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.

Realna Schurova forma (nastavak)

- Lako se može provjeriti da je npr.

$$u = \begin{bmatrix} 1-i \\ 1+i \end{bmatrix}$$

svojstveni vektor od $\alpha + i\beta$, i

$$\bar{u} = \begin{bmatrix} 1+i \\ 1-i \end{bmatrix}$$

svojstveni vektor od $\alpha - i\beta$.

Realna Schurova forma (nastavak)

Teorem. 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.

Realna Schurova forma (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.

Realna Schurova forma (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, $\mathrm{span}\{y, z\}$ predstavlja dvodimenzionalni realni invarijantni potprostor od A.

Realna Schurova forma (nastavak)

- Neka je

$$\begin{bmatrix} y & z \end{bmatrix} = U_1 \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = U_1(:, 1:2)R, \quad U_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}, R \in \mathbb{R}^{2\times 2}$$

QR faktorizacija matrice $\begin{bmatrix} y & z \end{bmatrix}$.

- Tada vrijedi

$$AU_1 \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = U_1 \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix},$$

odnosno

$$U_1^T A U_1 \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Realna Schurova forma (nastavak)

- Za particiju

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

iz prethodne jednakosti slijedi

$$\begin{bmatrix} T_{11}R \\ T_{21}R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

- Kako je $T_{21}R = 0$, zbog regularnosti matrice R slijedi $T_{21} = 0$.

Realna Schurova forma (nastavak)

- Dakle, možemo zaključiti

$$U_1^T A U_1 = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{bmatrix}, \quad T_{11} = R \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix} R^{-1}$$

  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

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

Realna Schurova forma (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.

Realna Schurova forma (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. ■

Realna Schurova forma (nastavak)

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

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

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 $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ sadrži svojstvene vrijednosti, a odgovarajući stupci od U su svojstveni vektori.

Realna Schurova forma (nastavak)

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.

Čitanje svojstvenih vektora

Ako smo matricu doveli u Schurovu formu, kako ćemo pronaći njezine svojstvene vektore?

Iz sličnosti znamo da su svojstveni vektori matrica T i A jednostavno vezani, tj. ako je

$$Tx = \lambda x,$$

onda je

$$AUx = UTx = \lambda Ux,$$

pa je Ux svojstveni vektor matrice A.

Ostaje nam samo pročitati svojstvene vektore matrice T iz njezine trokutaste forme.

Čitanje svojstvenih vektora (nastavak)

Jednostavnosti radi, pretpostavimo da tražimo svojstveni vektor za jednostruku realnu svojstvenu vrijednost $\lambda = t_{ii}$.

Linearni sustav za svojstvene vektore glasi $(T - \lambda I)x = 0$, odnosno, u blok formi

$$0 = \begin{bmatrix} T_{11} - \lambda I & T_{12} & T_{13} \\ 0 & 0 & T_{23} \\ 0 & 0 & T_{33} - \lambda I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix},$$

pri čemu je

- T_{11} matrica reda $i - 1$,
- $T_{22} = 0$ reda 1,
- T_{33} reda $(n - i)$.

Čitanje svojstvenih vektora (nastavak)

Blok vektori x_1, x_2 i x_3, redom, odgovaraju dimenzijama matrica T_{11}, T_{22} i T_{33}.

Budući da je λ jednostruka, onda su matrice $T_{33} - \lambda I$ i $T_{11} - \lambda I$ regularne, pa iz posljednje blok-jednadžbe slijedi da mora biti

$$x_3 = 0,$$

a iz prve blok jednadžbe slijedi da je

$$(T_{11} - \lambda I)x_1 = -T_{12}x_2.$$

Broj x_2 možemo proizvoljno odabrati, tako da vektor x nije nul-vektor.

Čitanje svojstvenih vektora (nastavak)

Recimo, uzmimo $x_2 = 1$. Tada izlazi da je

$$x_1 = -(T_{11} - \lambda I)^{-1} T_{12}.$$

Prema tome, svojstveni vektor za svojstvenu vrijednost λ je

$$x = \begin{bmatrix} -(T_{11} - \lambda I)^{-1} T_{12} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Drugim riječima, da bismo dobili svojstveni vektor x, moramo riješiti trokutasti linearni sustav za x_1.

Računanje svojstvenog vektora za kompleksnu svojstvenu vrijednost zahtijeva rješavanje blok-gornjetrokutastog sustava.

Svođenje na Hessenbergovu i tridijagonalnu formu

Podjela svojstvenog problema

Ima mnogo podjela algoritama prema vrsti svojstvenog problema. Navedimo neke od njih. Postoje algoritmi za:

- (puni) simetrični svojstveni problem,
- (puni) nesimetrični svojstveni problem,
- za matrične parove (engl. matrix pairs, pencils)

  $$Kx = \lambda Mx,$$

  (najčešće je jedna od matrica, M, pozitivno definitna),
- svojstveni problem za velike rijetke matrice (i simetrične i nesimetrične),
- matrice sa specijalnom strukturom (antisimetične, palindromne, hamiltonovske, ...).

Podjela svojstvenog problema (nastavak)

Nadalje, algoritmi se dijele i prema tome

- koliko svojstvenih vrijednosti želimo izračunati.

Postoje algoritmi koji računaju:

- sve svojstvene vrijednosti,
- najmanju/najveću svojstvenu vrijednost,
- ili nekoliko najmanjih/najvećih svojstvenih vrijednosti (po apsolutnoj vrijednosti),
- te svojstvene vrijednosti najbliže nekom zadanom broju.

Za hermitske matrice:

- sve svojstvene vrijednosti iz nekog intervala — tipična primjena je na matricama u tridijagonalnoj formi.

Svojstveni problem za pune matrice

Algoritmi i za (puni) simetrični i za nesimetrični svojstveni problem, najčešće, zbog efikasnosti

- rade na matricama u “kondenziranoj” formi.

Iznimka je

- Jacobijev algoritam u hermitskom slučaju, odnosno, norm-reducirajući algortimi tipa Eberlein u nesimetričnom slučaju.

Kondenzirana forma za nesimetrični problem je

- Hessenbergova forma,

koja se u simetričnom slučaju svodi na

- tridijagonalnu formu.

Numeričko računanje Schurove dekompozicije

Algoritam se sastoji od 2 koraka:

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

Hessenbergova forma

Definicija. Za $n \times n$ matricu A ćemo reći da je u gornjoj Hessenbergovoj formi ako vrijedi

$$a_{ij} = 0, \quad \text{za} \quad i > j + 1,$$

tj. matrica A je gornjetrokutasta i ima još jednu sporednu dijagonalu ispod glavne.

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

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

Hessenbergova forma (nastavak)

Svođenje na Hessenbergovu formu provodi se

- korištenjem unitarnih sličnosti, tj. traži se unitarna matrica Q takva da je QAQ^* gornja Hessenbergova.
- Ideja redukcije vrlo je slična QR faktorizaciji, samo se norma stupca, s jedne strane, umjesto na dijagonalni element, "nabacuje" na element ispod glavne dijagonale.

Kako do Hessenbergove forme?

Primjer. Pokažimo to na primjeru realne 4×4 matrice A:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}.$$

Korištenjem Householderovog reflektora H_1

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 1 & \\ & H_1 \end{bmatrix},$$

možemo poništiti elemente prvog stupca u matrici A, od mjesta 3 do n (ovdje je $n = 4$),

Kako do Hessenbergove forme? (nastavak)

pa imamo

$$Q_1 A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & a_{34}^{(1)} \\ 0 & a_{42}^{(1)} & a_{43}^{(1)} & a_{44}^{(1)} \end{bmatrix}.$$

Nakon toga primijenimo matricu Q_1^T zdesna, pa dobijemo

$$Q_1 A Q_1^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & a_{14}^{(2)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} \\ 0 & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} & a_{44}^{(2)} \end{bmatrix}.$$

Kako do Hessenbergove forme? (nastavak)

Nakon toga biramo ortogonalnu matricu

$$Q_2 = \begin{bmatrix} I_2 & \\ & H_2 \end{bmatrix},$$

takvu da poništi elemente drugog stupca koji se nalaze od mjesta 4 do n (ovdje je $n = 4$),

$$Q_2 Q_1 A Q_1^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & a_{14}^{(2)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(3)} & a_{33}^{(3)} & a_{34}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(3)} & a_{44}^{(3)} \end{bmatrix}.$$

Kako do Hessenbergove forme? (nastavak)

Transformaciju Q_2^T moramo primijeniti i zdesna

$$Q_2 Q_1 A Q_1^T Q_2^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(4)} & a_{14}^{(4)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(4)} & a_{24}^{(4)} \\ 0 & a_{32}^{(3)} & a_{33}^{(4)} & a_{34}^{(4)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(4)} & a_{44}^{(4)} \end{bmatrix}.$$

Time smo završili postupak.

Postupak smo mogli, umjesto Householderovim reflektorima, provesti i Givensovim rotacijama.

Hessenbergova forma za računanje Schurove

Najprije nam treba sljedeća propozicija.

Propozicija. Svojstvene vrijednosti nereducirane Hessenbergove matrice H imaju geometrijsku kratnost jedan.

Dokaz. Za svaku svojstvenu vrijednost λ od H je rang matrice $H - \lambda_i I$ barem $n-1$ jer su prvih $n-1$ stupaca od $H - \lambda_i I$ linearno nezavisni. To znači da je defekt najviše 1, i odgovarajući svojstveni potprostor je najviše jednodimenzionalan. ∎

- U kontekstu računanja Schurove dekompozicije, numerički algoritmi uvijek rade na nereduciranim Hessenbergovim matricama.

Hessenbergova forma za računanje Schurove

- 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.

Simetrična Hessenbergova forma

Ako je matrica A bila simetrična, onda je simetrična i njezina Hessenbergova forma

$$Q_{n-2} \cdots Q_1 A Q_1^T \cdots Q_{n-2}^T,$$

pa je svođenje na Hessenbergovu formu, zapravo, tridijagonalizacija.

Definicija. Kažemo da je $n \times n$ matrica T tridijagonalna ako je

$$t_{ij} = 0 \quad \text{za } |i - j| > 1.$$

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

Osnovni QR algoritam

Osnovni QR algoritam

QR algoritam je

- jedna je od najpoznatijih metoda za računanje svojstvenih vrijednosti matrica,
- otkrili su je nezavisno John Francis i Vera Kublanovskaja 1961–1962.

Algoritam (QR algoritam bez pomaka).

zadana nesimetrična matrica $A_0 = A$;
$i = 0$;
ponavljaj {
    faktoriziraj $A_i = Q_i R_i$ /* QR faktorizacija */;
    $A_{i+1} = R_i Q_i$;
    $i = i + 1$;
} do konvergencije

QR algoritam i sličnost

Propozicija. Matrice izračunate QR algoritmom imaju sljedeća svojstva:

- Za svaki i je
$$A_{i+1} = Q_i^* A_i Q_i,$$
tj. algoritam generira niz unitarno sličnih matrica.
- Za svaki i je
$$A_{i+1} = (Q_0 \cdots Q_i)^* A (Q_0 \cdots Q_i).$$

Dokaz.

- Budući da je $Q_i^* A_i = R_i$, uvrštavanjem u relaciju za A_{i+1} dobivamo
$$A_{i+1} = Q_i^* A_i Q_i.$$

QR algoritam i sličnost (nastavak)

- Induktivno, koristeći prethodnu tvrdnju, imamo:

$$\begin{aligned} A_{i+1} &= Q_i^* A_i Q_i \\ &= Q_i^* Q_{i-1}^* A_{i-1} Q_{i-1} Q_i = \cdots \\ &= (Q_0 \cdots Q_i)^* A_0 (Q_0 \cdots Q_i) \end{aligned}$$

$\blacksquare$

QR algoritam je “najsretniji” kad mu damo singularnu matricu, jer je QR faktorizacija otkriva u jednom koraku. Nakon toga radi deflaciju.

Algoritmu dodati pomake (engl. shifts) za ubrzanje konvergencije. O konvergenciji govori sljedeći teorem.

Konvergencija QR algoritma

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_i izračunat QR algoritmom konvergira u sljedećem smislu: Postoje dijagonalne unitarne matrice Φ_i takve da je za $Q = \lim_{i \to \infty} Q_0 \cdots Q_i \Phi_i$

$$\lim_{i \to \infty} (\Phi_i)^* A_{i+1} \Phi_i = \begin{bmatrix} \lambda_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & \lambda_2 & * & \cdots & * \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_{n-1} & * \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{bmatrix} = Q^* A Q.$$

QR algoritam s pomacima

Ako su svojstvene vrijednosti matrice A jednake λ_i, onda su svojstvene vrijednosti matrice $A - \sigma I$ jednake $\lambda_i - \sigma$.

Ideja: pomak σ birati "blizu" svojstvenim vrijednostima.

Posljedica. Ubrzavanje konvergencije!

Algoritam (QR algoritam s pomacima).

zadana nesimetrična matrica $A_0 = A$;
$i = 0$;
ponavljaj {
    izaberi pomak σ_i /* blizu svojstvene vrijednosti */;
    faktoriziraj $A_i - \sigma_i I = Q_i R_i$ /* QR faktorizacija */;
    $A_{i+1} = R_i Q_i + \sigma_i I$;
    $i = i + 1$;
} do konvergencije

QR algoritam s pomacima i sličnost

Propozicija. Matrice A_{i+1} i A_i dobivene QR iteracijama s pomakom su unitarno slične.

Dokaz. Iz

$$Q_i R_i = A_i - \sigma_i I$$

dobivamo da je

$$R_i = Q_i^* (A_i - \sigma_i I),$$

pa onda izlazi

$$A_{i+1} = R_i Q_i + \sigma_i I = (Q_i^* (A_i - \sigma_i I)) Q_i + \sigma_i I = Q_i^* A_i Q_i.$$

∎

Problemi QR algoritma

Problemi koje treba uočiti:

- QR faktorizacija pune matrice traje $\mathcal{O}(n^3)$ operacija po faktorizaciji. Ako napravimo pomak jednak svojstvenoj vrijednosti, možemo ju otkriti u jednom koraku – ukupno trajanje QR iteracija bilo bi $\mathcal{O}(n^4)$.

  Rješenje: raditi na matrici u Hessenbergovoj formi.
- Kako treba izabrati pomak σ_i da bi se ubrzala konvergencija u slučaju kompleksne svojstvene vrijednosti, ako je matrica bila realna? Kompleksni pomak nije dobar izbor!
- Kako treba birati pomak u slučaju hermitskih matrica?
- Kako prepoznati konvergenciju prema realnoj Schurovoj formi?

Nesimetrični QR algoritam

Svojstvo Hessenbergove forme

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

- Matrice Q i RQ su također Hessenbergove.
- Ako je H nereducirana Hessenbergova i singularna, onda je $r_{nn} = 0$ i $r_{jj} \neq 0$ za $j = 1, \ldots, n-1$.

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 $*$.

Svojstvo Hessenbergove forme (nastavak)

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

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

Svojstvo Hessenbergove forme (nastavak)

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

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

Svojstvo Hessenbergove forme (nastavak)

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

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

Svojstvo Hessenbergove forme (nastavak)

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

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

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

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

Svojstvo Hessenbergove forme (nastavak)

- Dalje, u našem 5×5 primjeru je

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

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

Svojstvo Hessenbergove forme (nastavak)

$$Q = \begin{bmatrix} c_1 & -s_1 c_2 & s_1 s_2 c_3 & -s_1 s_2 s_3 c_4 & s_1 s_2 s_3 s_4 \\ \bar{s}_1 & c_1 c_2 & -s_2 c_1 c_3 & s_2 s_3 c_1 c_4 & -s_2 s_3 s_4 c_1 \\ 0 & \bar{s}_2 & c_2 c_3 & -s_3 c_2 c_4 & s_3 s_4 c_2 \\ 0 & 0 & \bar{s}_3 & c_3 c_4 & -s_4 c_3 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{s}_4 & c_4 \end{bmatrix},$$

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

- Lako se provjeri da je produkt RQ gornje trokutaste i Hessenbergove matrice nužno Hessenbergova matrica.

Svojstvo Hessenbergove forme (nastavak)

- U slučaju nereducirane 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 $r_{nn} = 0$.

■

Korolar. Ako QR iteracije $H_i = Q_i R_i$; $H_{i+1} = R_i Q_i$ primijenimo na Hessenbergovu matricu H, onda su sve matrice H_i, Q_i Hessenbergove.

Složenost QR algoritma na Hessenberg. matr.

- Razmotrimo još sada složenost ovakvog algoritma.
- Početna redukcija matrice A na Hessenbergovu formu H zahtijeva $\mathcal{O}(n^3)$ operacija (samo jednom!).
- Kako QR iteracije čuvaju Hessenbergovu formu, svaka QR faktorizacija $H_i = Q_i R_i$ se računa sa $\mathcal{O}(n^2)$ operacija.
- To je bitno brže od QR faktorizacije $A_i = Q_i R_i$ općenite kvadratne matrice za koju je potrebno $\mathcal{O}(n^3)$ operacija.
- Kako je Q_i produkt od $n-1$ Givensovih rotacija, a svaku od njih se može primijeniti s $\mathcal{O}(n)$ operacija, onda $H_{i+1} = R_i Q_i$ pokazuje da je prijelaz sa H_i na H_{i+1} moguć sa samo $\mathcal{O}(n^2)$ aritmetičkih operacija.

Implicitni Q teorem

Za implementaciju pomaka u QR metodi i za simetrične i za nesimetrične matrice, potreban nam je sljedeći teorem.

Teorem (Implicitni Q teorem). Neka je $Q^T AQ = H$ nereducirana gornja Hessenbergova matrica. Stupci matrice Q, od drugog do n-tog, jedinstveno su određeni (do na predznak) prvim stupcem matrice Q. ∎

Nereducirana $=$ H nema nula na najdonjoj dijagonali.

Dokaz teorema, recimo, pogledati u knjizi: J. W. Demmel, "Applied Numerical Linear Algebra" (str. 168).

Prethodni teorem kaže kako se računa matrica Q_i u QR algoritmu.

Implicitni Q teorem — primjena

Iz A_i se izračuna sljedeća iteracija $A_{i+1} = Q_i^T A_i Q_i$ ovako:

- prvi stupac matrice Q_i je paralelan s prvim stupcem matrice $A_i - \sigma_i I$, jedino mu je norma jednaka 1, tj.
  - treba samo normirati prvi stupac od $A_i - \sigma_i I$;
- ostali stupci matrice Q_i računaju se tako da Q_i bude ortogonalna, a A_{i+1} je nereducirana Hessenbergova.

Prema implicitnom Q teoremu, tada znamo da smo A_{i+1} korektno izračunali, jer je Q_i jedinstvena do na predznak stupaca.

Jednostruki pomak

Ako su svojstvene vrijednosti jednostruke, onda bismo mogli raditi tzv. jednostruke pomake (engl. single shift).

Promotrimo algoritam na realnoj matrici reda 6. Neka je, zasad, Q_1 rotacija

$$Q_1 = \begin{bmatrix} c_1 & -s_1 & & & & \\ s_1 & c_1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix},$$

i neka je A gornja Hessenbergova.

Jednostruki pomak — “gonjenje izbočine”

Djelovanjem s Q_1^T slijeva i Q_1 zdesna, transformirana matrica A, u oznaci A_1, poprima sljedeći oblik

$$A_1 = Q_1^T A Q_1 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ \star & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}.$$

Pritom, $\star$ označava element koji je prije transformacije bio 0, međutim, djelovanjem transformacije prestao je biti 0.

Jednostruki pomak — “gonjenje izbočine”

“Izbočinu” (engl. bulge) $\star$ treba “istjerivati” (engl. chasing the bulge) izvan matrice i to tako da slijeva uzmemo rotaciju Q_2^T u $(2,3)$ ravnini, koja će poništiti taj novostvoreni element.

Naravno, istom rotacijom (samo transponiranom) moramo djelovati i zdesna. Novi Q_2 izgleda ovako

$$Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & c_2 & -s_2 & & & \\ & s_2 & c_2 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Jednostruki pomak — “gonjenje izbočine”

Nakon djelovanja s Q_2^T slijeva, dobivamo

$$A_2 = Q_2^T A_1 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}.$$

Jednostruki pomak — “gonjenje izbočine”

Međutim, nakon primjene Q_2 zdesna, imamo

$$A_2 = Q_2^T A_1 Q_2 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & \star & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix},$$

što znači da se “izbočina” pomaknula jedno mjesto dolje i desno.

Jednostruki pomak — “gonjenje izbočine”

U sljedećem koraku, poništimo tu izbočinu korištenjem Givensove rotacije u ravnini $(3, 4)$,

$$Q_3 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & c_3 & -s_3 & & \\ & & s_3 & c_3 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Algoritam ponavljamo dok posljednje izbočenje ne izbacimo izvan matrice. To će se dogoditi djelovanjem rotacije Q_5 u $(5, 6)$ ravnini i matrica $A_5 = Q_5^T A_4 Q_5$ će ponovno biti u gornjoj Hessenbergovoj formi.

Jednostruki pomak (nastavak)

Primijetimo da je djelovanje na matricu A bilo ovim redom

$$Q^T A Q = (Q_1 Q_2 Q_3 Q_4 Q_5)^T A Q_1 Q_2 Q_3 Q_4 Q_5,$$

i da je dobivena matrica $Q^T A Q$ opet gornja Hessenbergova. Uočimo još i izgled konačne matrice Q,

$$Q = \begin{bmatrix} c_1 & * & * & * & * & * \\ s_1 & * & * & * & * & * \\ & s_2 & * & * & * & * \\ & & s_3 & * & * & * \\ & & & s_4 & * & * \\ & & & & s_5 & * \end{bmatrix}.$$

Jednostruki pomak (nastavak)

Prvi stupac od Q određuje, do na predznak, sve ostale stupce u Q (implicitni Q teorem). Prvi stupac matrice Q izabrat ćemo tako da je

- proporcionalan s prvim stupcem $A - \sigma I$.

To znači da je naš Q jednak onome koji bi bio dobiven QR faktorizacijom od $A - \sigma I$.

Ipak, u praksi se obično ne koriste jednostruki pomaci, jer dvostruki pomaci imaju bolja svojstva (brža konvergencija).

Dvostruki pomak

Ako je matrica $A = A_0$ realna, a ima kompleksnih svojstvenih vrijednosti, treba napraviti pomak za σ i $\bar{\sigma}$

$$\begin{aligned} A_0 - \sigma I &= Q_1 R_1, \\ A_1 &= R_1 Q_1 + \sigma I, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_1 - \bar{\sigma} I &= Q_2 R_2, \\ A_2 &= R_2 Q_2 + \bar{\sigma} I. \end{aligned}$$

Odatle odmah izlazi da je $A_2 = Q_2^T Q_1^T A_0 Q_1 Q_2$.

Lema. Matrice Q_1 i Q_2 možemo izabrati tako da vrijedi

- $Q_1 Q_2$ je realna, pa je i A_2 realna,
- prvi stupac matrice $Q_1 Q_2$ se lako računa.

Dvostruki pomak (nastavak)

Dokaz. Redom, iz prve dvije transformacije izlazi

$$\begin{aligned} Q_1Q_2R_2R_1 &= Q_1(A_1 - \bar{\sigma}I)R_1 = Q_1(R_1Q_1 + (\sigma - \bar{\sigma})I)R_1 \\ &= Q_1R_1Q_1R_1 + (\sigma - \bar{\sigma})Q_1R_1 \\ &= (A_0 - \sigma I)^2 + (\sigma - \bar{\sigma})(A_0 - \sigma I) \\ &= A_0^2 - (\sigma + \bar{\sigma})A_0 + |\sigma|^2 I =: M. \end{aligned}$$

Zbog $\sigma + \bar{\sigma} = 2\,\mathrm{Re}\,\sigma \in \mathbb{R}$, prethodna matrica M je realna.

- Onda je $Q_1Q_2R_2R_1$ QR faktorizacija realne matrice. Zato Q_1Q_2 i R_2R_1 možemo izabrati kao realne matrice.
- Prvi stupac matrice Q_1Q_2 je proporcionalan prvom stupcu matrice M, a ostali stupci se računaju korištenjem implicitnog Q teorema. ∎

Dvostruki pomak (nastavak)

I ovaj algoritam natjerava “izbočinu”, samo je ona, zbog dvostrukog pomaka, 2×2 izbočina.

Razlog: matrica $M = (A - \sigma I)^2 + (\sigma - \bar{\sigma})(A - \sigma I)$ ima jednu donju sporednu dijagonalu više od A, zbog kvadriranja.

Na primjer, za matricu A reda 6, to izgleda ovako:

$$A = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}, \qquad M = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \end{bmatrix}.$$

Dvostruki pomak — “gonjenje izbočine”

Ovdje zahtijevamo da je prvi stupac od $Q_1 Q_2$ proporcionalan prvom stupcu matrice M (lako se računa iz A).

Neka je A ponovno matrica reda 6. Prvu ortogonalnu transformaciju $\widetilde{Q}_1^T$ biramo tako da je njezin prvi stupac proporcionalan prvom stupcu matrice M (isto kao i ranije). Dobivamo

$$\widetilde{Q}_1^T A = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ \star & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}$$

Dvostruki pomak — "gonjenje izbočine"

i

$$\widetilde{Q}_1^T A \widetilde{Q}_1 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ \star & * & * & * & * & * \\ \star & \star & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}.$$

Sljedeća transformacija $\widetilde{Q}_2^T$ poništava elemente $(3,1)$ i $(4,1)$, "nabacujući" njihovu normu na element $(2,1)$.

Ona mijenja samo retke 2, 3 i 4 u gornjoj matrici.

Dvostruki pomak — “gonjenje izbočine”

Transformaciju $\widetilde{Q}_2^T$ možemo realizirati kao

- par Givensovih rotacija, ili
- “kratki” Householderov reflektor (netrivijalni elementi u vektoru w su w_2, w_3 i w_4).

Dobivamo

$$\widetilde{Q}_2^T \widetilde{Q}_1^T A \widetilde{Q}_1 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & \star & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}$$

Dvostruki pomak — “gonjenje izbočine”

Nakon primjene $\widetilde{Q}_2$ zdesna, izlazi

$$\widetilde{Q}_2^T \widetilde{Q}_1^T A \widetilde{Q}_1 \widetilde{Q}_2 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & \star & * & * & * & * \\ & \star & \star & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}.$$

Dakle, trokutasta 2×2 “izbočina” se pomaknula jedno mjesto dolje i desno.

Sada, vrlo slično kao u jednostrukom pomaku, “izbočinu” pomičemo prema kraju matrice, sve dok ju ne izbacimo.

Izbor pomaka

Najčešće se pomak (engl. shift) bira kao svojstvene vrijednosti 1×1 ili 2×2 podmatrice u donjem desnom kutu matrice A:

- ako imamo jednostruki pomak, onda uzmemo $\sigma = a_{nn}$,
- ako imamo dvostruki pomak, onda uzmemo tzv. Francisov pomak, tj. σ i $\overline{\sigma}$ su svojstvene vrijednosti matrice

$$\begin{bmatrix} a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{bmatrix}.$$

Izbor pomaka (nastavak)

Nažalost, ovakav dvostruki pomak, iako je izvrstan u praksi, može ne raditi. Na primjer, matricu

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

ostavlja na miru.

Izbor pomaka za simetrični tridijagonalni QR

Za simetrični tridijagonalni QR algoritam, pomak se bira kao

- a_{nn} (kubična konvergencija, ali ne konvergira uvijek),
- svojstvena vrijednost bloka

$$\begin{bmatrix} a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ a_{n-1,n} & a_{n,n} \end{bmatrix}$$

koja je najbliža $a_{n,n}$. Taj izbor pomaka zove se Wilkinsonov pomak. Može se pokazati da su simetrične QR iteracije s tim pomakom kubično konvergentne za gotovo sve matrice A.