

ΜΑΡΙΛΕΝΑ ΜΗΤΡΟΥΛΗ

Τμήμα Μαθηματικών
Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΑΛΓΕΒΡΑ

ΚΑΙ

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΙ

Αθήνα 2022

Εκδόσεις ΕΚΠΑ

Κεφάλαιο 1

Αριθμητικός Υπολογισμός Ιδιοτιμών

Ο υπολογισμός των ιδιοτιμών ενός τετραγωνικού πίνακα απαιτείται σε πάρα πολλές εφαρμογές. Ο θεωρητικός ορισμός των ιδιοτιμών από τις ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου έχει αξία μόνο θεωρητικά, αφού η εύρεση ριζών πολυωνύμου οδηγεί σε ασταθή αλγόριθμο.

Δυσκολίες στον υπολογισμό ιδιοτιμών με την χρήση του χαρακτηριστικού πολυωνύμου

Πρώτον, η διαδικασία ακριβούς υπολογισμού των συντελεστών του χαρακτηριστικού πολυωνύμου μπορεί να είναι αριθμητικά ασταθής.

Δεύτερον, οι ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου μπορεί να είναι ευαίσθητες σε διαταραχές των συντελεστών του. Συνεπώς αν οι συντελεστές του χαρακτηριστικού πολυωνύμου δεν υπολογίζονται επακριβώς, θα υπάρχουν σφάλματα στις υπολογισμένες ιδιοτιμές.

Η κεντρική ιδέα αντιμετώπισης του προβλήματος εύρεσης των ιδιοτιμών του πίνακα A έγκειται στο μετασχηματισμό του πίνακα A μέσω μετασχηματισμών ομοιότητας, οι οποίοι διατηρούν τις ιδιοτιμές, σε μία κατάλληλη μορφή από την οποία μπορούν εύκολα να προκύψουν οι ιδιοτιμές. Δεδομένου ότι οι ορθογώνιοι πίνακες έχουν δείκτη κατάστασης ως προς τη φασματική νόρμα (ή την F) ίσο με τη μονάδα, μέσω ορθογώνιων μετασχηματισμών ομοιότητας μπορεί να εξασφαλισθεί ευσταθής υπολογισμός. Πράγματι εάν ο πίνακας A μετασχηματίζεται σ' έναν πίνακα B με χρήση ορθογώνιων μετασχηματισμών ομοιότητας, τότε μία μεταβολή στον A επιφέρει μεταβολή ίδιου με-

γέθους στο B . Συγκεκριμένα εάν

$$B = U^T A U,$$

U ορθογώνιος και

$$B + \Delta B = U^T (A + \Delta A) U,$$

τότε

$$\|\Delta B\|_2 = \|\Delta A\|_2.$$

Παράδειγμα 1.0.1.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} -0.5774 & -0.5774 & -0.5774 \\ -0.5774 & 0.7887 & -0.2113 \\ -0.5774 & -0.2113 & 0.7887 \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} 13 & -0.6340 & -2.3660 \\ -0.9019 & 0 & 0 \\ -6.0981 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Delta A = 10^{-5} I_3,$$

$$A_1 = A + \Delta A = \begin{pmatrix} 1.00001 & 2 & 3 \\ 3 & 4.00001 & 5 \\ 6 & 7 & 8.00001 \end{pmatrix},$$

$$B_1 = U^*(A + \Delta A)U = \begin{pmatrix} 13.00001 & -0.633974 & -2.3660 \\ -0.9019 & 0.00001 & 0 \\ -6.0981 & 0 & 0.00001 \end{pmatrix},$$

$$\Delta B = B_1 - B = 10^{-5} I_3, \quad \|\Delta A\|_2 = \|\Delta B\|_2 = 10^{-5}.$$

□

1.1 Η βασική QR-επανάληψη

Η καλύτερη μορφή πίνακα που εμφανίζει άμεσα τις ιδιοτιμές του, είναι μια τριγωνική μορφή, οι διαγώνιοι είσοδοι της οποίας είναι οι ιδιοτιμές του πίνακα.

Στη συνέχεια αναφέρουμε ένα αποτέλεσμα που αφορά τη δημιουργία ενός σχεδόν τριγωνικού πίνακα R , γνωστού ως πραγματική κανονική μορφή (Real Schur Form, RSF) ενός πίνακα A .

Θεώρημα 1.1.1. (Τριγωνοποίησης Schur) Έστω $A \in C^{n \times n}$ πίνακας, τότε υπάρχει unitary πίνακας U έτσι ώστε

$$U^*AU = T$$

όπου T τριγωνικός πίνακας με τις ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ σε διαγώνιες εισόδους.

Απόδειξη. Θα χρησιμοποιήσουμε επαγωγή στο n .

Εάν $n = 1$ ισχύει. Έστω ότι το θεώρημα είναι αληθές για $n - 1$. Θα δείξουμε ότι είναι αληθές για n . Έστω x_1 ιδιοδιάνυσμα του A που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ_1 με $x_1^*x_1 = 1$ (unitary). Αρχίζοντας από το x_1 παράγουμε μια ορθοκανονική βάση του C^n , έστω $x_1, v_1, \dots, v_{n-1}$.

Έστω $V = [v_1, \dots, v_{n-1}] \in C^{n \times (n-1)}$ ο πίνακας με στήλες $v_1, \dots, v_{n-1}$. Ο πίνακας $U_1 = [x_1 | V]$ είναι unitary ($U_1^*U_1 = I_n$) και $V^*x_1 = 0$ επειδή το x_1 είναι ορθογώνιο προς τα v_i .

$$\text{Συνεπώς } A_1 = U_1^*AU_1 = \begin{bmatrix} x_1^* \\ V^* \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} x_1 & V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^* \\ V^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 x_1 & AV \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & x_1^*AV \\ 0 & \underbrace{V^*AV}_{\hat{A}} \end{bmatrix},$$

Εκτός από τη λ_1 οι ιδιοτιμές του A και $\hat{A}$ είναι ίδιες. Από την υπόθεσή μας υπάρχει πίνακας unitary V_1 $(n-1) \times (n-1)$ έτσι ώστε

$$\hat{T} = V_1^* \hat{A} V_1$$

να είναι τριγωνικός. Εάν ορίσουμε τον πίνακα

$$U_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & V_1 & \\ 0 & & & \end{bmatrix}$$

τότε U_2 unitary (επειδή ο U_1 είναι unitary) και $U_2^*A_1U_2 = U_2^*U_1^*AU_1U_2 = U^*AU$ όπου $U = U_1U_2$. Έτσι

$$U^*AU = \begin{bmatrix} \lambda_1 & * & \dots & * \\ 0 & & & \\ \vdots & & V_1^* \hat{A} V_1 = \hat{T} & \\ 0 & & & \end{bmatrix}$$

Επειδή ο $\hat{T}$ είναι τριγωνικός είναι και ο U^*AU τριγωνικός. Οι ιδιοτιμές είναι διαγώνια στοιχεία επειδή ο πίνακας είναι τριγωνικός. $\square$

Θεώρημα 1.1.2. (Η πραγματική τριγωνοποίηση Schur)

Έστω A $n \times n$ πραγματικός πίνακας. Τότε υπάρχει $n \times n$ ορθογώνιος πίνακας Q έτσι ώστε

$$Q^T A Q = R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & \cdots & R_{1k} \\ \vdots & R_{22} & & R_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & R_{kk} \end{pmatrix},$$

όπου κάθε R_{ii} είναι είτε βαθμωτό είτε 2×2 πίνακας. Οι βαθμωτές ορθογώνιες εισόδοι αντιστοιχούν σε πραγματικές ιδιοτιμές, ενώ οι 2×2 πίνακες στις διαγώνιες εισόδους αντιστοιχούν σε συζυγείς μιγαδικές ιδιοτιμές.

Ορισμός: Ο πίνακας R του παραπάνω θεωρήματος είναι γνωστός ως Πραγματική Μορφή Schur (RSF) του πίνακα A .

Παρατηρήσεις:

- (i) Οι 2×2 πίνακες στη διαγώνιο του R αναφέρονται σα “bumps”.
- (ii) Η RSF δεν είναι μοναδική.

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τη μέθοδο της QR-επανάληψης για τον υπολογισμό της RSF ενός πίνακα A . Η μέθοδος QR, εφαρμοζόμενη κατάλληλα, χρησιμοποιείται σήμερα ευρέως για τον υπολογισμό των ιδιοτιμών ενός τυχαίου πίνακα A . Όπως λέει και το όνομά της, η μέθοδος στηρίζεται στην παραγοντοποίηση QR και η φύση της είναι επαναληπτική. Επειδή οι ιδιοτιμές ενός πίνακα A είναι οι ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου και είναι γνωστό ότι οι ρίζες ενός τυχαίου πολυωνύμου βαθμού μεγαλύτερου από 4 δεν μπορούν να προσδιορισθούν σ'ένα πεπερασμένο αριθμό βημάτων, έπεται ότι κάθε αριθμητική μέθοδος υπολογισμού ιδιοτιμών θα έχει φύση επαναληπτική.

Αρχικά παρουσιάζουμε τη βασική QR-επαναληπτική μέθοδο.

Θέτουμε $A_0 = A$. Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας QR παραγοντοποίηση, δημιουργούμε την ακολουθία πινάκων $\{A_k\}$ που ορίζεται ως εξής:

$$\begin{aligned} A_0 &= Q_0 R_0, \\ A_1 &= R_0 Q_0 = Q_1 R_1, \\ A_2 &= R_1 Q_1 = Q_2 R_2, \\ &\vdots \end{aligned}$$

Γενικά παίρνουμε

$$A_k = Q_k R_k = R_{k-1} Q_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Αλγόριθμος Βασική Επανάληψη QR

Έστω $n \times n$ πίνακας A . Ο παρακάτω αλγόριθμος παράγει ακολουθία πινάκων A_k που διατηρούν τις ιδιοτιμές του πίνακα A .

Βήμα 1: $A_0 = A$

Βήμα 2: **for** $k = 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned} A_{k-1} &= Q_{k-1} R_{k-1} \\ &\text{(παραγοντοποίηση QR)} \\ A_k &= R_{k-1} Q_{k-1} \\ &\text{(reverse multiplication)} \end{aligned}$$

Λήμμα 1.1.1. Κάθε πίνακας που παράγεται από την επανάληψη QR είναι ορθογώνια όμοιος με τον προηγούμενό του και, κατά συνέπεια, είναι ορθογώνια όμοιος με τον αρχικό πίνακα.

Απόδειξη.

$$A_1 = R_0 Q_0 = Q_0^T A_0 Q_0 \quad (\text{επειδή } Q_0^T A_0 = R_0),$$

$$A_2 = R_1 Q_1 = Q_1^T A_1 Q_1.$$

Έτσι ο A_1 είναι ορθογώνια όμοιος με τον A και ο A_2 είναι ορθογώνια όμοιος με τον A_1 . Κατά συνέπεια και ο A_2 είναι ορθογώνια όμοιος με τον A όπως φαίνεται παρακάτω:

$$A_2 = Q_1^T A Q_1 = Q_1^T (Q_0^T A_0 Q_0) Q_1 = (Q_0 Q_1)^T A_0 (Q_0 Q_1).$$

□

Επειδή κάθε πίνακας είναι ορθογώνια όμοιος με τον A έχει τις ίδιες με αυτόν ιδιοτιμές και έτσι εάν η ακολουθία πινάκων $\{A_k\}$ συγκλίνει σε μια τριγωνική ή σχεδόν τριγωνική μορφή μπορούμε άμεσα να προσδιορίσουμε τις ιδιοτιμές. Το παρακάτω θεώρημα εξασφαλίζει τις συνθήκες σύγκλισης της ακολουθίας $\{A_k\}$.

Θεώρημα 1.1.3. (Θεώρημα σύγκλισης για τη βασική QR-επανάληψη)

Έστω ότι οι ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ του πίνακα A είναι τέτοιες ώστε $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$ και έστω ότι οι κύριες υποορίζουσες του πίνακα των αριστερών ιδιοδιανυσμάτων είναι μη μηδενικές. Τότε η ακολουθία $\{A_k\}$ συγκλίνει σε μία άνω τριγωνική μορφή γνωστή ως πραγματική μορφή Schur (RSF).

Στην πραγματικότητα μπορεί να αποδειχθεί ότι εάν ισχύουν οι προηγούμενες συνθήκες η πρώτη στήλη του A_k προσεγγίζει ένα πολλαπλάσιο του e_1 . Έτσι για αρκετά μεγάλο k παίρνουμε:

$$A_k = \begin{pmatrix} \lambda_1 & u \\ 0 & \hat{A}_k \end{pmatrix}$$

Εφαρμόζουμε και πάλι QR -επανάληψη στον $\hat{A}_k$ και η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι τη σύγκλιση της ακολουθίας σε μια άνω τριγωνική μορφή.

Παράδειγμα 1.1.1. *Εστω*

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix},$$

με ιδιοτιμές $\lambda_1 = 5.3723$ και $\lambda_2 = -0.3723$ για τις οποίες ισχύει $|\lambda_1| > |\lambda_2|$.
Να εφαρμοσθεί QR -επανάληψη για τον προσδιορισμό αυτών των ιδιοτιμών.

$k = 0$

$$A_0 = A = Q_0 R_0,$$

$$Q_0 = \begin{pmatrix} -0.3162 & -0.9487 \\ -0.9487 & 0.3162 \end{pmatrix}, R_0 = \begin{pmatrix} -3.1623 & -4.4272 \\ 0 & -0.6325 \end{pmatrix}.$$

$k = 1$

$$A_1 = R_0 Q_0 = \begin{pmatrix} 5.2 & 1.6 \\ 0.6 & -0.2 \end{pmatrix} = Q_1 R_1,$$

$$Q_1 = \begin{pmatrix} -0.9934 & -0.1146 \\ -0.1146 & -0.9934 \end{pmatrix}, R_1 = \begin{pmatrix} -5.2345 & -1.5665 \\ 0 & -0.3821 \end{pmatrix}.$$

$k = 2$

$$A_2 = R_1 Q_1 = \begin{pmatrix} 5.3796 & -0.9562 \\ 0.0438 & -0.3796 \end{pmatrix} = Q_2 R_2.$$

Ήδη έχει δημιουργηθεί πρόοδος στον προσδιορισμό των ιδιοτιμών.

$$Q_2 = \begin{pmatrix} -1 & -0.0082 \\ -0.0081 & 1 \end{pmatrix}, R_2 = \begin{pmatrix} -5.3797 & 0.9593 \\ 0 & -0.3718 \end{pmatrix}.$$

$k = 3$

$$A_3 = R_2 Q_2 = \begin{pmatrix} 5.3718 & 1.0030 \\ 0.0030 & -0.3718 \end{pmatrix} = Q_3 R_3,$$

$$Q_3 = \begin{pmatrix} 1 & -0.0006 \\ -0.0006 & 1 \end{pmatrix}, R_3 = \begin{pmatrix} -5.3718 & -1.0028 \\ 0 & -0.3723 \end{pmatrix}.$$

$k = 4$

$$A_4 = R_3 Q_3 = \begin{pmatrix} 5.3723 & -0.9998 \\ 0.0002 & -0.3723 \end{pmatrix}.$$

Εάν σταματήσουμε στην τέταρτη επανάληψη θεωρούμε ότι

$$RSF(A) = \begin{pmatrix} 5.3723 & -0.9998 \\ 0.0002 & -0.3723 \end{pmatrix}.$$

Επομένως οι ιδιοτιμές του A είναι οι διαγώνιοι είσοδοι του πίνακα $RSF(A)$. $\square$

Παρατήρηση: Έστω πίνακας A διάστασης $n \times n$. Η εφαρμογή της QR-επανάληψης απαιτεί σε κάθε επανάληψη τον υπολογισμό της παραγοντοποίησης QR του A , διαδικασία της οποίας η πολυπλοκότητα είναι της τάξης $O(n^3)$. Εάν απαιτηθούν n επαναλήψεις, η πολυπλοκότητα θα ανέλθει σε n^4 , καθιστώντας έτσι τη μέθοδο μη αποτελεσματική. Πρέπει λοιπόν να αναζητηθεί κάποιο άλλο εργαλείο που θα βελτιώσει την πολυπλοκότητα.

1.2 Πίνακες Hessenberg (σχεδόν τριγωνικοί)

Ορισμός: Ένας τετραγωνικός πίνακας A είναι άνω (κάτω) Hessenberg (upper (lower) Hessenberg) εάν $a_{ij} = 0$ για $i > j + 1$ ($a_{ij} = 0$ για $j > i + 1$)

$$\begin{pmatrix} * & * & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ * & \vdots & & & * \\ * & * & \cdots & \cdots & * \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} * & \cdots & \cdots & * & * \\ * & \cdots & \cdots & * & * \\ \vdots & \ddots & & \vdots & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & & & * & * \end{pmatrix}$$

Άνω Hessenberg Κάτω Hessenberg

Ένας άνω (κάτω) Hessenberg πίνακας $A = (a_{ij})$ είναι μη ανηγμένος (unreduced) εάν $a_{i,i-1} \neq 0$, $i = 2, 3, \dots, n$ ($a_{i,i+1} \neq 0$, $i = 1, 2, \dots, n-1$)

Παράδειγμα 1.2.1.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ μη ανηγμένος κάτω Hessenberg}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \end{pmatrix} \text{ μη ανηγμένος άνω Hessenberg}$$

□

Παρατήρηση: Η αναγωγή ενός πίνακα στη μορφή άνω Hessenberg είναι πολύ σημαντική στους υπολογισμούς ιδιοτιμών. Επίσης η μορφή Hessenberg αποτελεί χρήσιμο εργαλείο σε πολλές άλλες εφαρμογές όπως στη θεωρία ελέγχου και την επεξεργασία σήματος.

Θεώρημα 1.2.1. (Αναγωγή Hessenberg)

Έστω A πίνακας διάστασης $n \times n$. Πάντοτε υπάρχει ορθογώνιος πίνακας P $n \times n$ τέτοιος ώστε

$$PAP^T = H_u,$$

όπου H_u πίνακας άνω Hessenberg.

Απόδειξη. Η απόδειξη θα γίνει κατασκευαστικά. Ο πίνακας P θα κατασκευαστεί ως το γινόμενο $(n-2)$ πινάκων Householder P_1 έως P_{n-2} . Ο P_1 κατασκευάζεται έτσι ώστε να εισάγει μηδενικά στην πρώτη στήλη του A κάτω από την είσοδο $(2,1)$. Ο P_2 κατασκευάζεται έτσι ώστε να δημιουργεί μηδενικά κάτω από την είσοδο $(3,2)$ στη δεύτερη στήλη του πίνακα $P_1AP_1^T$ κ.ο.κ. Η όλη διαδικασία χρειάζεται $(n-2)$ βήματα. (Ας σημειώσουμε ότι ένας $n \times n$ πίνακας Hessenberg περιέχει τουλάχιστον $\frac{(n-2)(n-1)}{2}$ μηδενικά).

Συγκεκριμένα έχουμε τα εξής βήματα:

Βήμα 1: Προσδιορίζουμε έναν πίνακα Householder $\hat{P}_1$ διάστασης $n - 1$ έτσι ώστε

$$\hat{P}_1 \begin{pmatrix} \alpha_{21} \\ \alpha_{31} \\ \vdots \\ \alpha_{n1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ορίζουμε τον πίνακα $P_1 = \begin{pmatrix} I_1 & O \\ O & \hat{P}_1 \end{pmatrix}$ και υπολογίζουμε τον πίνακα

$$A \equiv A^{(1)} = P_1 A P_1^T = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & \cdots & * \\ * & * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & \cdots & * \end{pmatrix}.$$

Βήμα 2: Προσδιορίζουμε έναν πίνακα Householder $\hat{P}_2$ διάστασης $(n - 2)$ έτσι ώστε

$$\hat{P}_2 \begin{pmatrix} \alpha_{32} \\ \vdots \\ \vdots \\ \alpha_{n2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ορίζουμε τον πίνακα $P_2 = \begin{pmatrix} I_2 & O \\ O & \hat{P}_2 \end{pmatrix}$ και υπολογίζουμε τον πίνακα

$$A \equiv A^{(2)} = P_2 A^{(1)} P_2^T = \begin{pmatrix} * & * & * & \cdots & \cdots & * \\ * & * & * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & 0 & * & \cdots & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & * & \cdots & \cdots & * \end{pmatrix}.$$

Στο τέλος των $(n-2)$ βημάτων, ο πίνακας $A^{(n-2)}$ είναι πίνακας άνω Hessenberg H_u . Ο πίνακας H_u είναι ορθογώνιος όμοιος με τον A όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\begin{aligned} H_u &= A^{(n-2)} = P_{n-2} A^{(n-3)} P_{n-2}^T = P_{n-2} (P_{n-3} A^{(n-4)} P_{n-3}^T) P_{n-2}^T = \dots \\ &= (P_{n-2} P_{n-3} \dots P_1) A (P_1^T P_2^T \dots P_{n-3}^T P_{n-2}^T). \end{aligned}$$

Θέτουμε $P = P_{n-2} P_{n-3} \dots P_1$ και προκύπτει

$$H_u = P A P^T.$$

Ο πίνακας P είναι ορθογώνιος ως γινόμενο ορθογώνιων πινάκων. □

Παρατήρηση: Λόγω της μορφής που έχει κάθε πίνακας P_k

$$P_k = \begin{pmatrix} I_k & O \\ O & \hat{P}_k \end{pmatrix},$$

ο εκ δεξιών πολλ/σμός του $P_k A$ επί P_k^T δεν χαλάει τη δομή των μηδενικών που έχει ήδη δημιουργήσει το γινόμενο $P_k A$.

Για παράδειγμα, εάν $n = 4$ και $k = 1$, τότε

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix},$$

$$P_1 A = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix}$$

και

$$P_1 A P_1^T = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix}.$$

Παράδειγμα 1.2.2.

Να προσδιορίσετε την αναγωγή Hessenberg H_u του πίνακα

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Στους υπολογισμούς θα χρησιμοποιήσουμε αριθμητική τεσσάρων ψηφίων. Επειδή $n = 3$ έχουμε να εκτελέσουμε μόνο ένα βήμα. Διαμορφώνουμε τον $\hat{P}_1$ έτσι ώστε:

$$\hat{P}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$u_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \sqrt{2}e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\hat{P}_1 = I_2 - \frac{2u_2u_2^T}{u_2^T u_2} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 0.2929 \begin{pmatrix} 5.8284 & 2.4142 \\ 2.4142 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.7071 & -0.7071 \\ -0.7071 & 0.7071 \end{pmatrix}.$$

Διαμορφώνουμε τον P_1 :

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & & \\ 0 & \hat{P}_1 & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7071 & -0.7071 \\ 0 & -0.7071 & 0.7071 \end{pmatrix},$$

$$A \equiv A^{(1)} = P_1 A P_1^T = \begin{pmatrix} 0 & -2.1213 & 0.7071 \\ -1.4142 & 3.5000 & -0.5000 \\ 0 & 1.5000 & -0.5000 \end{pmatrix} = H_u.$$

□

Παρατηρήσεις:

1. Κάθε πίνακας Householder P_k ορίζεται μονοσήμαντα από το διάνυσμα u_{n-k} που καθορίζει τον πίνακα $\hat{P}_k$. Έτσι κάθε φορά θα αποθηκεύουμε το διάνυσμα u_{n-k} . Εάν χρειάζεται αναλυτικά ο πίνακας P , αυτός μπορεί να υπολογισθεί από τους πίνακες Householder P_1 έως P_{n-2} .

2. Το διάνυσμα $u_{n-k} = (u_{k+1,k}, \dots, u_{n,k})^T$ έχει $(n-k)$ συνιστώσες, ο δε αριθμός των μηδενικών που παράγει στο k βήμα είναι $(n-k-1)$. Έτσι οι συνιστώσες 2 έως

$(n - k)$ του u_{n-k} μπορούν να αποθηκευθούν στις θέσεις $(k + 2, k)$ έως (n, k) του A , η δε πρώτη συνιστώσα θα αποθηκεύεται ξεχωριστά.

3. Ο πίνακας $A^{(k)} = P_k A^{(k-1)} P_k^T$ μπορεί να υπολογισθεί χωρίς ποτέ να δημιουργήσουμε αναλυτικά τον πίνακα P_k . Συγκεκριμένα,

$$A^{(k)} = P_k A^{(k-1)} P_k^T = \begin{pmatrix} I_k & O \\ O & \hat{P}_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B & C \\ O & \underline{b} & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_k & O \\ O & \hat{P}_k^T \end{pmatrix},$$

όπου B είναι $k \times k$ πίνακας Hessenberg, $\hat{P}_k$ είναι πίνακας Householder διάστασης $(n - k)$ και $\underline{b}$ διάνυσμα. Το διάνυσμα $\hat{P}_k \underline{b}$ είναι πολλαπλάσιο του e_1 . Ο πίνακας $\hat{P}_k D \hat{P}_k^T$ υπολογίζεται χωρίς να δημιουργήσουμε αναλυτικά τον πίνακα P_k .

4. Οι μη μηδενικές είσοδοι του $A^{(k)}$ μπορούν να αποθηκευθούν πάνω στον A . Έτσι στο τέλος του $(n - 2)$ βήματος θα έχουμε:

$$A \equiv A^{(n-2)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n} \\ u_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & u_{42} & & & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & & & \vdots \\ u_{n1} & u_{n2} & \cdots & \cdots & u_{n \ n-2} & a_{n \ n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Το διάνυσμα v που περιέχει τις πρώτες συντεταγμένες των διανυσμάτων u_{n-k} δίνεται ως:

$$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{21} \\ u_{32} \\ u_{43} \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{n-1 \ n-2} \end{pmatrix}.$$

Έτσι, όλες οι πληροφορίες που χρειάζονται για τον υπολογισμό του P αποθηκεύονται στο κάτω τριγωνικό μέρος του A (κάτω από τη διαγώνιο) και στο διάνυσμα v .

1.3 Αλγόριθμος αναγωγής Householder-Hessenberg

Έστω $n \times n$ πίνακας A . Ο παρακάτω αλγόριθμος καθορίζει τα διανύσματα

$u_{n-k} = (u_{k+1,k}, \dots, u_{nk})^T$, $k = 1, \dots, n-1$ που ορίζουν τους πίνακες Householder $\hat{P}_k$, $k = 1, 2, \dots, n-2$ (και κατά συνέπεια και τους πίνακες P_k) έτσι ώστε εάν $P = P_{n-2}P_{n-3} \dots P_2P_1$, ο πίνακας $H_u = PAP^T$ είναι άνω Hessenberg. Οι συνιστώσες $u_{k+2,k}$ έως $u_{n,k}$ του διανύσματος u_{n-k} αποθηκεύονται στις αντίστοιχες θέσεις $(k+2)$ έως (n, k) του A . Οι πρώτες συντεταγμένες $u_{k+1,k}$ αποθηκεύονται στο διάνυσμα $v = (v_1, v_2, \dots, v_n)^T$. Οι μη μηδενικές εισόδους του $A^{(k)} = P_k A P_k^T$ υπερκαλύπτουν αυτές τον A .

for $k = 1, 2, \dots, n-2$

Βήμα 1: Καθορίστε το διάνυσμα $u_{n-k} = (u_{k+1,k}, \dots, u_{nk})^T$ που ορίζει πίνακα Householder.

$$\hat{P}_k = I_{n-k} - 2 \frac{u_{n-k} u_{n-k}^T}{(u_{n-k}^T u_{n-k})}$$

τάξης $(n-k)$ έτσι ώστε

$$\hat{P}_k \begin{pmatrix} \alpha_{k+1,k} \\ \vdots \\ \alpha_{n,k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Βήμα 2: Υπερκαλύψη του $a_{\kappa+1,\kappa}$ από το σ
 $a_{\kappa+1,\kappa} \equiv \sigma$

Βήμα 3: Αποθήκευση του διανύσματος u_{n-k} ως εξής:

$$v_\kappa \equiv u_{\kappa+1,\kappa}$$

$$a_{\kappa+i,\kappa} \equiv u_{\kappa+i,\kappa}, \quad i = 2, \dots, n-k$$

Βήμα 4: Υπολογίστε την ποσότητα

$$b = \frac{2}{u_{n-k}^T u_{n-k}}.$$

Βήμα 5: Ενημέρωση των εισόδων του A στις στήλες $k+1$ έως n και στις γραμμές $k+1$ έως n πολλαπλασιάζοντας εξ' αριστερών με $\hat{P}_k$.

for $j = k+1, \dots, n$

$$s = b \sum_{i=k+1}^n u_{ik} \alpha_{ij}$$

$$a_{ij} \equiv a_{ij} - s u_{ik}, \quad i = k+1, \dots, n$$

Ενημέρωση των εισόδων του A στις στήλες $k+1$ έως n και

στις γραμμές 1 έως n πολλαπλασιάζοντας εκ δεξιών με $\hat{P}_k$.

for $i = 1, 2, \dots, n$

$$s = b \sum_{j=k+1}^n a_{ij} u_{jk}$$

$$a_{ij} = a_{ij} - s u_{jk}, \quad j = k+1, \dots, n$$

Πολυπλοκότητα: Ο αλγόριθμος χρειάζεται $\frac{5}{3}n^3$ flops για να υπολογίσει τον H_u . Εάν χρειάζεται ο αναλυτικός υπολογισμός του πίνακα P θα χρειασθούν επιπλέον

$\frac{2}{3}n^3$ flops. Για μεγάλα n δημιουργούνται σοβαρά αποθηκευτικά προβλήματα εάν χρειάζεται αναλυτικά ο πίνακας P .

Ευστάθεια: Έχει αποδειχθεί ότι ο πίνακας H_u που υπολογίζεται ικανοποιεί τη σχέση

$$P^T H_u P = A + E, \quad \text{όπου} \quad \|E\|_f \leq cn^2 u \|A\|_F.$$

Παράδειγμα 1.3.1.

Να μετασχηματισθεί ο πίνακας

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 3 & 7 & 9 \\ 2 & 5 & 3 \end{pmatrix}$$

σε μορφή άνω Hessenberg και να προσδιοριστεί ο πίνακας P .

Απαιτείται ένα μόνο βήμα. Υπολογίζουμε το διάνυσμα $u_2 = (u_{21}, u_{31})^T$ έτσι ώστε

$$\hat{P}_1 \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} = \left(I - \frac{2u_2 u_2^T}{u_2^T u_2} \right) \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow u_2 = \begin{pmatrix} 2.2019 \\ 0.6667 \end{pmatrix}, \quad \sigma = -3.6056.$$

Ενημερώνουμε τις εισόδους του A και προκύπτει

$$A \equiv H_u = \begin{pmatrix} 1 & -4.4376 & 3.0509 \\ -3.6056 & 12.2308 & -2.8462 \\ 0.6667 & 1.1538 & -2.2308 \end{pmatrix} \Rightarrow v = u_{21} = 2.2019.$$

□

1.3.1 Τριδιαγώνια αναγωγή

Εάν ο πίνακας A είναι συμμετρικός, τότε από τη σχέση $PAP^T = H_u$ προκύπτει ότι ο πίνακας άνω Hessenberg H_u είναι επίσης συμμετρικός και κατά συνέπεια τριδιαγώνιος. Έτσι, εάν ο παραπάνω αλγόριθμος εφαρμοσθεί σ'έναν συμμετρικό πίνακα A ο προκύπτων πίνακας H_u θα είναι ένας συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας T . Λαμβάνοντας υπ' όψη τη συμμετρία, απαιτείται λιγότερη μνήμη για αποθήκευση και μόνο $\frac{2}{3}n^3$ flops για τον υπολογισμό του T αντί των $\frac{5}{3}n^3$ flops που χρειάζονται για τον υπολογισμό του H_u .

Παράδειγμα 1.3.2.

Να προσδιορίσετε την τριδιαγώνιο αναγωγή του συμμετρικού πίνακα

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Αφού $n = 3$, απαιτείται μόνο ένα βήμα. Διαμορφώνουμε τον $\hat{P}_1$:

$$\hat{P}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$u_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \sqrt{2}e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\hat{P}_1 = I_2 - \frac{2u_2u_2^T}{u_2^Tu_2} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - .2929 \begin{pmatrix} 5.8284 & 2.4142 \\ 2.4142 & 1.0000 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.7071 & -0.7071 \\ -0.7071 & 0.7071 \end{pmatrix}.$$

Διαμορφώνουμε τον P_1 :

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & & \\ 0 & \hat{P}_1 & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7071 & -0.7071 \\ 0 & -0.7071 & 0.7071 \end{pmatrix}.$$

Τελικά προκύπτει η ακόλουθη τριδιαγώνια αναγωγή

$$H_u = P_1 A P_1^T = \begin{pmatrix} 0 & -1.4142 & 0 \\ -1.4142 & 2.5000 & 0.5000 \\ 0 & 0.5000 & 0.5000 \end{pmatrix}$$

□

1.3.2 Αναγωγή Givens-Hessenberg

Ο μετασχηματισμός ενός πίνακα A σε άνω Hessenberg μορφή H_u μπορεί να επιτευχθεί και με μετασχηματισμούς Givens. Όμως η κατασκευή του ορθογώνιου πίνακα P ώστε να ισχύει η σχέση $PAP^T = H_u$ πρέπει να γίνει με κατάλληλο ορισμό των πινάκων Givens. Για παράδειγμα, στο πρώτο βήμα οι περιστροφές Givens $J(2, 3, \theta)$, $J(2, 4, \theta)$, ..., $J(2, n, \theta)$ θα διαμορφώσουν τον πίνακα $P_1 = J(2, n, \theta) \cdots J(2, 4, \theta)J(2, 3, \theta)$, η

ενημέρωση του πίνακα $A^{(1)} = P_1 A P_1^\top$ ο οποίος θα έχει μηδενικά στην πρώτη στήλη κάτω από την είσοδο $(2, 1)$. Αυτή η αναγωγή θα χρειαστεί περίπου $\frac{10}{3}n^3$ flops για να υπολογιστεί ο H_u , σχεδόν διπλάσια από αυτά που χρειάζονται για την αναγωγή Householder.

Ιδιότητα στρογγύλευσης. Η ιδιότητα στρογγύλευσης είναι το ίδιο απαραίτητη όπως η μέθοδος Householder. Η μέθοδος είναι αριθμητικά ευσταθής.

Παράδειγμα 1.3.3. Θεωρήστε τον πίνακα A του Παραδείγματος 8.2.2. Να μετασχηματισθεί σε άνω Hessenberg μορφή με μετασχηματισμούς Givens.

Βήμα 1. Βρείτε c και s τέτοια ώστε

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix} : c = \frac{1}{\sqrt{2}}, s = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Βήμα 2.

$$P_1 = J(2, 3, \theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} :$$

$$A = P_1 A P_1^\top = \begin{pmatrix} 0 & 2.1213 & 0.7171 \\ 1.4142 & 3.5000 & 0.5000 \\ 0 & -1.5000 & -0.5000 \end{pmatrix} \quad \square$$

□

Παρατήρηση. Ο άνω Hessenberg που προκύπτει με μετασχηματισμούς Givens είναι ‘‘σχεδόν’’ ο ίδιος όπως και αν τον βρίσκαμε με την μέθοδο Householder (Παράδειγμα 8.2.2). (Διαφέρουν μόνο στα πρόσημα κάποιων εισόδων).

1.3.3 Implicit-Q-theorem

Μοναδικότητα της αναγωγής Hessenberg

Το παραπάνω παράδειγμα και η παρατήρηση που έγινε σε αυτό γεννά το ερώτημα περί μοναδικότητας της αναγωγής Hessenberg. Την απάντηση θα μας τη δώσει το Implicit Q theorem.

Θεώρημα 1.3.1 (Implicit-Q-theorem). Έστω $Q = [q_1, q_2, \dots, q_n]$, $V = [v_1, v_2, \dots, v_n]$ ορθογώνιοι πίνακες με την ιδιότητα ότι και οι δύο δίνουν τις παραγοντοποιήσεις

$$\begin{aligned} Q^\top A Q &= H \\ V^\top A V &= G \end{aligned}, \quad H, G \text{ άνω Hessenberg}$$

Έστω κ ο μικρότερος θετικός δείκτης για τον οποίο $h_{\kappa+1, \kappa} = 0$ με την παραδοχή ότι $\kappa = n$ εάν H είναι *unreduced*. Εάν $\underline{v}_1 = \underline{q}_1$ τότε $v_i = \pm q_i$ και $|h_{i, i-1}| = |g_{i, i-1}|$ $i = 2, \dots, \kappa$. Επιπλέον, εάν $\kappa < n$ τότε $g_{\kappa+1, \kappa} = 0$

Απόδειξη. Ορίζουμε τον ορθογώνιο πίνακα

$$W = [w_1, \dots, w_n] = V^\top Q$$

Παρατηρούμε ότι ισχύει

$$GW = WH$$

γιατί

$$\begin{aligned} GW &= \underbrace{V^\top A V}_G \underbrace{V^\top Q}_W = V^\top A Q \\ WH &= W Q^\top A Q = V^\top Q Q^\top A Q \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι αφού

$$GW = WH$$

$$G \cdot [w_1 w_2 \dots w_n] = [w_1 w_2 \dots w_n] \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & & \\ h_{21} & h_{22} & & \\ 0 & h_{32} & h_{33} & \\ \vdots & & & \end{bmatrix}$$

$$Gw_1 = w_1 h_{11} + w_2 h_{21} + \dots, \text{ μέχρι το πρώτο } 0$$

Έτσι για $i = 2, \dots, \kappa$ (μέχρι το κ οπότε δε θα μηδενιστεί) έχουμε

$$h_{i, i-1} w_i = Gw_{i-1} - \sum_{j=1}^{i-1} h_{j, i-1} w_j \quad (1.1)$$

Ο πίνακας $[w_1, \dots, w_\kappa]$ είναι άνω τριγωνικός λόγω της μορφής

$$H = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} \\ \cancel{h_{31}} \nearrow 0 & h_{32} & h_{33} & h_{34} \\ \cancel{h_{41}} \nearrow 0 & \cancel{h_{42}} \nearrow 0 & h_{43} & h_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$h_{21}w_2 = Gw_1 - h_{11}w_1 \Rightarrow h_{21}w_2 = \begin{bmatrix} g_{11} \\ g_{21} \\ g_{31} \nearrow 0 \\ g_{41} \nearrow 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} g_{11} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \overbrace{\text{span}\{\underline{e}_2\}}^{= V^\top \cdot \underline{q}_1}$$

Αφού $w_1 = \underline{e}_1$ (επειδή $v_1 = q_1$) $\Rightarrow [w_1, \dots, w_\kappa]$ άνω τριγωνικός και επομένως $w_i = \pm e_i$, $i = 2, \dots, \kappa$.

Αφού $w_i = V^\top q_i$ και $H = W^\top GW \Rightarrow h_{i,i-1} = w_i^\top Gw_{i-1} \Rightarrow v_i = \pm q_i$, $\underline{w}_i = \pm e_i$, $i = 2, \dots, \kappa$ και $|h_{i,i-1}| = |g_{i,i-1}|$, $i = 2, \dots, \kappa$

Εάν $\kappa < n$, $h_{\kappa+1,\kappa} = 0$ τότε αγνοώντας τα πρόσημα προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} g_{\kappa+1,\kappa} &= e_{\kappa+1}^\top G e_\kappa = e_{\kappa+1}^\top G W e_\kappa = (e_{\kappa+1}^\top W)(H e_\kappa) \\ &= e_{\kappa+1}^\top \sum_{i=1}^{\kappa} h_{i\kappa} W e_i = \sum_{i=1}^{\kappa} h_{i\kappa} e_{\kappa+1}^\top e_i = 0 \end{aligned}$$

□

Παρατήρηση: Εάν $\begin{matrix} Q^\top A Q = H \\ Z^\top A Z = G \end{matrix}$ όπου G, H μη ανηγμένος άνω Hessenberg και Q, Z έχουν την ίδια πρώτη στήλη, τότε οι πίνακες G, H είναι ‘‘περίπου’’ ίδιοι με την έννοια ότι $G = D^{-1} H D$ όπου $D = \text{diag}(\pm 1, \dots, \pm 1)$.

Το Implicit Q theorem μπορεί να διατυπωθεί και ως εξής.

Θεώρημα 1.3.2 (Implicit Q theorem). Έστω P και Q ορθογώνιοι πίνακες τέτοιοι ώστε $P^\top A P = H_1$ και $Q^\top A Q = H_2$ είναι δύο *unreduced* άνω Hessenberg πίνακες. Υποθέτουμε ότι P και Q έχουν τις ίδιες πρώτες στήλες. Τότε H_1 και H_2 είναι απαραίτητως ίδιοι με την έννοια ότι $H_2 = D^{-1} H_1 D$, όπου

$$D = \text{diag}(\pm 1, \dots, \pm 1)$$

Παρατηρούμε ότι εάν συμβολίσουμε τους πίνακες Hessenberg των παραδειγμάτων 8.2.2 και 8.2.3 που λάβαμε από τις μεθόδους Householder και Givens αντίστοιχα, ως H_1 και H_2 αντίστοιχα, τότε χρησιμοποιώντας τους συμβολισμούς του προηγούμενου θεωρήματος, έχουμε

$$P = P_1, \quad Q^\top = J(2, 3, \theta)$$

Και ο P και ο Q έχουν τις ίδιες πρώτες στήλες, ειδικότερα, την πρώτη στήλη του ταυτοτικού πίνακα και επαληθεύστε ότι $H_2 = D^{-1} H_1 D$, όπου $D = \text{diag}(1, -1, 1)$. □

1.4 Ο πρακτικός αλγόριθμος QR

Αρχικά παρουσιάζουμε το βασικό αλγόριθμο της QR-επαναληπτικής μεθόδου.

Λήμμα 1.4.1. Έστω A πίνακας *unreduced upper Hessenberg* και έστω $A = QR$ η παραγοντοποίηση QR. Τότε ο πίνακας $A_1 = RQ$ είναι επίσης *unreduced upper Hessenberg*.

Απόδειξη. Εάν χρησιμοποιήσουμε μετασχηματισμούς Givens ώστε $A = QR$, τότε $Q = J(2, n, \theta) \cdots J(2, 4, \theta)J(2, 3, \theta)$ είναι επίσης *unreduced upper Hessenberg*. Αφού R είναι άνω τριγωνικός και Q *unreduced upper Hessenberg*, το γινόμενο τους είναι επίσης *unreduced upper Hessenberg*. $\square$

Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Ο παρακάτω αλγόριθμος υλοποιεί τη QR-επανάληψη έτσι ώστε το υπολογιστικό κόστος κάθε επανάληψης να είναι τετραγωνικό.

```

H = Q_0^T A Q_0 (Αναγωγή Hessenberg)
for k = 1, 2, ...
    H = QR
    H = RQ
end

```

Ταχύτητα σύγκλισης των επαναλήψεων

Με ποιο μέτρο επιτυγχάνεται η σύγκλιση; Πόσο γρήγορα τα στοιχεία κάτω από την διαγώνιο θα συγκλίνουν στο 0;

Εάν ο προηγούμενος αλγόριθμος δημιουργεί την ακολουθία πινάκων $\{H_k\}$ τότε αποδεικνύεται ότι η είσοδος κάτω από τη διαγώνιο $h_{i,i-1}^{(k)}$ του H_k συγκλίνει στο 0 με εύρος που καθορίζεται από το πηλίκο

$$\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}} \right|^k$$

Έτσι η ταχύτητα σύγκλισης θα είναι πολύ αργή εάν το μέτρο δύο ιδιοτιμών λ_i και λ_{i-1} είναι πολύ κοντά. Η σύγκλιση μπορεί να επιταχυνθεί εάν εισάγουμε τη διαδικασία μετακίνησης της αρχής (shift of origin)

Έστω $\hat{\lambda}_i$ προσέγγιση της ιδιοτιμής λ_i του H . Εφαρμόζουμε QR επανάληψη στον πίνακα $\hat{H} = H - \hat{\lambda}_i I$

Οι ιδιοτιμές του $\hat{H}$ είναι $\lambda_1 - \hat{\lambda}_i, \lambda_2 - \hat{\lambda}_i, \dots, \lambda_n - \hat{\lambda}_i$. Έστω ότι αυτές οι ιδιοτιμές είναι διατεταγμένες έτσι ώστε

$$|\lambda_1 - \hat{\lambda}_i| > |\lambda_2 - \hat{\lambda}_i| > \dots > |\lambda_n - \hat{\lambda}_i|$$

Τότε η i -κάτω από τη διαγώνιο είσοδος του $\hat{H}_k$ θα συγχλίνει στο 0 με εύρος καθοριζόμενο από το λόγο

$$\frac{|\lambda_i - \hat{\lambda}_i|^k}{|\lambda_{i-1} - \hat{\lambda}_i|}$$

και όχι από το λογο $\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}} \right|^k$.

Εάν για παράδειγμα $\lambda_i = 0.99$, $\lambda_{i-1} = 1.1$ και $\hat{\lambda}_i = 1$. Τότε

$$\left| \frac{\lambda_i - \hat{\lambda}_i}{\lambda_{i-1} - \hat{\lambda}_i} \right| = 0.1 \text{ ενώ } \left| \frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}} \right| = 0.9$$

Συμπέρασμα. Εάν εφαρμόσουμε την επανάληψη QR στο shifted πίνακα $\hat{H}$ η ταχύτητα σύγκλισης θα είναι γρηγορότερη. Έχοντας βρει την ιδιοτιμή του $\hat{H}$ η αντίστοιχη του H θα προσδιορισθεί εάν προσθέσουμε το χρησιμοποιηθέν shift.

Αλγόριθμος (Shifted QR-iteration)

Έστω $\mu \in \mathbb{R}$

$$H = Q_0^\top A Q_0 \quad (\text{Αναγωγή Hessenberg})$$

```

for k = 1, 2, ...
    Προσδιόρισε βαθμωτό  $\mu$ 
     $H - \mu I = QR$  (Παραγοντοποίηση QR)
     $H = RQ + \mu I$ 
end

```

Το βαθμωτό μ ονομάζεται shift. Κάθε πίνακας H είναι όμοιος με τον αρχικό A αφού $RQ + \mu I = Q^\top \underbrace{(QR + \mu I)}_H Q$.

Για την εφαρμογή της single-shift QR επανάληψης χρειαζόμαστε μία προσέγγιση $\hat{\lambda}_i$ μιας ιδιοτιμής. Επειδή αυτό στην πράξη δεν είναι εφικτό, η $h_{nn}^{(0)}$ δηλαδή η (n, n) είσοδος του $H = H_0$ επιλέγεται ως αρχική προσέγγιση. Στη συνέχεια, σε κάθε επανάληψη επιλέγεται η τρέχουσα (n, n) είσοδος ως τρέχον shift. Η επανάληψη θα συνεχίζεται έως ότου γίνεται πολύ μικρή η $h_{n,n-1}^{(k)}$ είσοδος.

Συγκεκριμένα,

```

for k = 1, 2, ... do until  $h_{n,n-1}^{(k)} < \varepsilon$ 
     $H_k - h_{n,n}^{(k)} I = Q_k R_k$ 
     $H_{k+1} = R_k Q_k + h_{n,n}^{(k)} I$ 
end

```

Παράδειγμα 1.4.1. *Single-shift QR-iteration*

$$H = H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$k = 0$

$$\begin{aligned}
 H_0 - h_{33}^{(0)} I &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = Q_0 R_0 \\
 Q_0 &= \begin{pmatrix} 0 & 0.7071 & -0.7071 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.7071 & 0.7071 \end{pmatrix} \\
 R_0 &= \begin{pmatrix} -1.0000 & -1.0000 & -3.0000 \\ 0 & 0.4142 & 0.7071 \\ 0 & 0 & -0.7071 \end{pmatrix} \\
 H_1 = R_0 Q_0 + h_{33}^{(0)} I &= \begin{pmatrix} 2.0000 & -2.8284 & -1.4142 \\ -1.4142 & 1.5000 & 0.5000 \\ 0 & -0.5000 & 0.5000 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$k = 1$

$$\begin{aligned}
 H_1 - h_{33}^{(1)} I &= Q_1 R_1 \\
 Q_1 &= \begin{pmatrix} -0.7276 & -0.6342 & -0.2615 \\ 0.6860 & -0.6727 & -0.2774 \\ 0 & -0.3812 & 0.9245 \end{pmatrix} \\
 R_1 &= \begin{pmatrix} -2.0616 & 2.7440 & 1.3720 \\ 0 & 1.3117 & 0.5606 \\ 0 & 0 & 0.2311 \end{pmatrix} \\
 H_2 = R_1 Q_1 + h_{33}^{(1)} I &= \begin{pmatrix} 3.8824 & -1.0613 & 1.0464 \\ 0.8998 & -0.5960 & 0.1544 \\ 0 & -0.0881 & 0.7137 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$k = 2$

$$\begin{aligned}
 H_2 - h_{33}^{(2)} I &= Q_2 R_2 \\
 Q_2 &= \begin{pmatrix} -0.9620 & 0.2721 & 0.0247 \\ -0.2732 & -0.9580 & -0.0870 \\ 0 & -0.0905 & 0.9959 \end{pmatrix} \\
 R_2 &= \begin{pmatrix} -3.2940 & 1.3787 & -1.0488 \\ 0 & 0.9740 & 0.1367 \\ 0 & 0 & 0.0124 \end{pmatrix} \\
 H_3 &= R_2 Q_2 + h_{33}^{(2)} I = \begin{pmatrix} 3.5057 & -2.1221 & -1.2459 \\ -0.2661 & -0.2318 & -0.0514 \\ 0 & -0.0011 & 0.7260 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

□

Η ταχύτητα σύγκλισης της λ_p κάτω, από τη διαγώνιο είσοδο, του H θα καθορίζεται από το πηλίκο

$$\left| \frac{\lambda_{p+1} - \mu}{\lambda_p - \mu} \right|^k$$

Εάν $\lambda_{p+1} = \lambda_p$ τότε δεν έχουμε σύγκλιση. Εάν όμως το μ είναι πιο κοντά στη λ_n από,τι στις άλλες ιδιοτιμές τότε ο μηδενισμός της $(n, n-1)$ εισόδου είναι ταχύς.

Θεώρημα 1.4.1. Έστω μ ιδιοτιμή του $n \times n$ unreduced Hessenberg πίνακα H . Έστω $\bar{H} = RQ + \mu I$ έτσι ώστε $H - \mu I = QR$ είναι η QR παραγοντοποίηση του $H - \mu I$, τότε $\bar{h}_{n,n-1} = 0$ και $\bar{h}_{n,n} = \mu$.

Απόδειξη. Αφού ο H είναι unreduced Hessenberg πίνακας, οι πρώτες $n-1$ στήλες του $H - \mu I$ είναι ανεξάρτητες (ανεξάρτητα της τιμής του μ). Έτσι εάν $QR = H - \mu I$, τότε $r_{ii} \neq 0$, $i = 1, \dots, n-1$. Επειδή μ είναι ιδιοτιμή $\det(H - \mu I) = 0$ και επομένως ο πίνακας $H - \mu I$ είναι ιδιάζων. Κατά συνέπεια $r_{11} \cdots r_{nn} = 0 \Rightarrow r_{nn} = 0$. Οπότε $\text{rank } R = n-1 \Rightarrow \text{rank } H = n-1$ και επομένως η n -γραμμή του $\bar{H}$ θα είναι $[0, \dots, 0, \mu]$. □

Αναγωγή (Deflation)

Χωρίς βλάβη της γενικότητας μπορούμε πάντα να υποθέτουμε ότι κάθε Hessenberg πίνακας H είναι unreduced.

Διαφορετικά, εάν σε κάποιο στάδιο προκύψει

$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ \mathbb{O} & H_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} p \\ n-p \\ p & n-p \end{matrix}$$

όπου $1 \leq p < n$ το πρόβλημα ανάγεται (decouples) σε δύο μικρότερα προβλήματα που περιέχουν τον H_{11} και τον H_{22} . Ο όρος deflation χρησιμοποιείται συνήθως για $p = n - 1$ ή $p = n - 2$.

Στην πράξη, decoupling εμφανίζεται όποτε μια κάτω από τη διαγώνιο είσοδος του H είναι αρκετά μικρή. Για παράδειγμα σε πολλά υπολογιστικά πακέτα εάν

$$|h_{p+1,p}| \leq c \cdot u (|h_{p,p}| + |h_{p+1,p+1}|)$$

για c μικρό τότε το $h_{p+1,p}$ 'δηλώνεται' σα μηδέν.

Παρατήρηση:

Εάν εκτελέσουμε shift με πραγματική ιδιοτιμή, τότε σε ακριβή αριθμητική προκύπτει deflation σ'ένα βήμα. Για παράδειγμα εάν

$$H = \begin{bmatrix} 9 & -1 & -2 \\ 2 & 6 & -2 \\ 0 & 1 & 5 \end{bmatrix}, \text{ 6 ιδιοτιμή του } H, \text{ } QR = H - 6I,$$

$$\overline{H} = RQ + 6I = \begin{bmatrix} 8.5384 & -3.7313 & -1.0090 \\ 0.6343 & 5.4615 & 1.3867 \\ 0.0000 & 0.0000 & 6.0000 \end{bmatrix}$$

1.4.1 Η στρατηγική του Double shift

Στη QR με το απλό shift μπορεί να εμφανιστούν δυσκολίες εάν σε κάποιο στάδιο οι ιδιοτιμές α_1 και α_2 του πίνακα

$$G = \begin{bmatrix} h_{mm} & h_{mn} \\ h_{nm} & h_{nn} \end{bmatrix} \text{ } m = n - 1$$

είναι μιγαδικές και κατά συνέπεια το h_{nn} (που είναι πραγματικός) αποτελεί φτωχή προσέγγιση ιδιοτιμής. Για παράδειγμα εάν

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -0.5 \end{bmatrix}$$

$$\text{ιδιοτ.}(M) = \begin{matrix} -0.25 + 0.9682i \\ -0.25 - 0.9682i \end{matrix}$$

Το $\textcircled{-0.5}$ φτωχή προσέγγιση.

Ένας τρόπος αποφυγής αυτής της δυσκολίας είναι η εισαγωγή δύο απλών shift επαναληπτικών βημάτων της QR διαδοχικά χρησιμοποιώντας σα shift τα α_1 και α_2 (δηλαδή της ιδιοτιμές, $\alpha_2 = \bar{\alpha}_1$).

Εκτελούμε την ακόλουθη διαδικασία:

$$H - \alpha_1 \cdot I = Q_1 R_1$$

$$H_1 = R_1 Q_1 + \alpha_1 I$$

$$H_1 - \alpha_2 I = Q_2 R_2$$

$$H_2 = R_2 Q_2 + \alpha_2 I$$

είναι άνω Hessenberg $\uparrow$

Παράδειγμα 1.4.2. Έστω

$$H_0 = H = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Να εφαρμοσθεί η διαδικασία δύο απλών shift επαναληπτικών βημάτων της QR διαδοχικά χρησιμοποιώντας σα shift τις ιδιοτιμές, i , $-i$.

$$H_0 - iI = Q_0 R_0 :$$

$$Q_0 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7071 & -0.7071i \\ 0 & 0.7071i & 0.7071 \end{pmatrix}$$

$$R_0 = \begin{pmatrix} -1+i & -2 & -2 \\ 0 & 1.4142i & -1.4142 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H_1 = R_0 Q_0 + iI = \begin{pmatrix} 1 & 1.412 - 1.4142i & -1.4142 + 1.4142i \\ 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i \end{pmatrix}$$

$$H_1 + iI = Q_1 R_1 :$$

$$Q_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.8165 & -0.5744i \\ 0 & 0.5744i & 0.8165 \end{pmatrix}$$

$$R_1 = \begin{pmatrix} -1-i & -1.4142 + 1.4142i & 1.4142 - 1.4142i \\ 0 & 0 & 1.1547 \\ 0 & 0 & 1.6330i \end{pmatrix}$$

$$H_2 = R_1 Q_1 - iI = \begin{pmatrix} 1 & 1.9712 - 0.3382i & 1.9712 - 0.3382i \\ 0 & -0.3333i & 0.9428 \\ 0 & -0.9428 & 0.3333i \end{pmatrix}$$

Παρατηρούμε ότι οι ιδιοτιμές του κάτω δεξιά 2×2 πίνακα $\begin{pmatrix} -0.3333i & 0.9428 \\ -0.9428 & 0.3333i \end{pmatrix}$ είναι i και $-i$.

Τελικά οι ιδιοτιμές του H_2 είναι $1, i, -i$. □

Αποφυγή μιγαδικής αριθμητικής

Παρατηρήσαμε ότι εάν εφαρμόσουμε τη διαδικασία δύο απλών shift επαναληπτικών βημάτων της QR διαδοχικά χρησιμοποιώντας σα shift δύο ιδιοτιμές οδηγούμαστε στη χρήση μιγαδικής αριθμητικής. Προκειμένου να αποφύγουμε την εισαγωγή πράξεων με μιγαδικούς, χρειαζόμαστε ένα διαφορετικό τρόπο δημιουργίας του πίνακα H_2 .)

Εάν θεωρήσουμε τον πίνακα $M = (H - \alpha_2 I)(H - \alpha_1 I)$ τότε:

$$\begin{aligned} (H - \alpha_2 I)(H - \alpha_1 I) &= (H - \alpha_2 I)Q_1 R_1 = \underbrace{Q_1 Q_1^*}_{I} (H - \alpha_2 I) Q_1 R_1 \\ &= Q_1 (\underbrace{Q_1^* H Q_1}_{H_1} - \alpha_2 I) R_1 = Q_1 Q_2 R_2 R_1 \end{aligned}$$

1.4 Ο πρακτικός αλγόριθμος QR

26

↓ άθροισμα ιδιοτιμών $\rightarrow$ trace (ίχνος)

Και έτσι $M = (Q_1 Q_2)(R_2 R_1)$

Όμως ο πίνακας M είναι **πραγματικός** ακόμα κιάν οι ιδιοτιμές του G είναι μιγαδικές. Γνωρίζουμε ότι για έναν πίνακα A ισχύει ότι:

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n = \text{tr}(A) = \sum_{i=1}^n \alpha_{ii}, \text{ για διακεκριμένες ιδιοτιμές}$$

$$\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdots \lambda_n = |A| = \det(A)$$

επομένως

$$\left. \begin{array}{l} M = H^2 - sH + tI \\ \text{(από τον ορισμό του)} \end{array} \right\} \begin{array}{l} s = \alpha_1 + \alpha_2 = \alpha_1 + \bar{\alpha}_1 \\ t = \alpha_1 \cdot \alpha_2 = \alpha_1 \cdot \bar{\alpha}_1 \end{array} \in \mathbb{R}$$

↑ ίχνη πίνακα α ορίζεται

$$h_{mm} + h_{nn} = \text{tr}(G) \in \mathbb{R}$$

$$t = \alpha_1 \alpha_2 = h_{mm} h_{nn} - h_{mn} h_{nm} = \det(G) \in \mathbb{R}$$

Έτσι η παραγοντοποίηση $M = (Q_1 Q_2)(R_2 R_1)$ είναι η QR παραγοντοποίηση ενός πραγματικού πίνακα και τα Q_1, Q_2 μπορούν να επιλεγούν έτσι ώστε ο πίνακας

$$Z = Q_1 Q_2$$

να είναι πραγματικός ορθογώνιος. Κατά συνέπεια

$$H_2 = Q_2^H H_1 Q_2 = Q_2^H (Q_1^H H Q_1) Q_2 = (Q_1 Q_2)^H H (Q_1 Q_2) = Z^T H Z \text{ πραγματικός}$$

Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα ότι ο πίνακας H_2 προκύπτει από τον H με πραγματικούς μετασχηματισμούς.

Τρόπος υπολογισμού του πίνακα H_2

$$\left. \begin{array}{l} \underline{\text{B1:}} \text{ Διαμόρφωσε τον πίνακα } M = H^2 - sH + tI \\ \underline{\text{B2:}} \text{ Υπολόγισε την QR παραγοντοποίηση } M = Z \cdot R \\ \underline{\text{B3:}} \text{ Θέσε } H_2 = Z^T H Z \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{Explicit double shift} \\ \text{QR-iteration} \end{array}$$

Δυσκολίες στην εφαρμογή αυτού του αλγορίθμου :

- 1) Τα σφάλματα στρογγύλευσης σχεδόν πάντοτε αναιρούν τον υπολογισμό ενός πραγματικού πίνακα M .
- 2) Το πρώτο βήμα απαιτεί $\mathcal{O}(n^3)$ flops και δεδομένου ότι η διαδικασία αυτή θα επαναλαμβάνεται, η εφαρμογή του καθίσταται μη αποτελεσματική.

Παράδειγμα 1.4.3. Έστω

$$H = H_0 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}$$

Να υπολογισθεί ο πίνακας H_2 .

Υπολογίζουμε s και t για τον κάτω δεξιό 2×2 υποπίνακα. $t = 2, s = 2$

$$M = H^2 - sH + tI = \begin{pmatrix} 3 & -8 & 5 \\ -1 & 2 & 3 \\ -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Βρίσκουμε την QR παραγοντοποίηση του M :

$$Q = \begin{pmatrix} -0.8018 & -0.5470 & -0.2408 \\ 0.2673 & 0.0322 & -0.9631 \\ 0.5345 & -0.8365 & 0.1204 \end{pmatrix}$$

$$H_2 = Q^\top H_0 Q = \begin{pmatrix} -0.8571 & 1.1007 & 2.5740 \\ -1.1867 & 3.0455 & -0.8289 \\ 0.0000 & 1.8437 & 0.8116 \end{pmatrix}$$

Σχόλιο : Παρατηρούμε ότι ο H_2 έχει πραγματικές εισόδους. □

1.5 Προσδιορισμός της Shur κανονικής μορφής

Το κυρίαρχο λοιπόν πρόβλημα στο διπλό επαναληπτικό σχήμα συνοψίζεται ως εξής

Explicit Double Shift QR-iteration step

Αναλυτική μελέτη των βημάτων

B1: Λόγω της μορφής του M έχουμε ότι: $M_{\underline{e}_1} = [x, y, z, 0, \dots, 0]^T$ όπου

$$\begin{aligned}x &= h_{11}^2 + h_{12}h_{21} - sh_{11} + t \\y &= h_{21}(h_{11} + h_{22} - s) \\z &= h_{21}h_{32}\end{aligned}$$

B2: Ο πίνακας P_0 μπορεί να καθορισθεί σε $\mathcal{O}(1)$ flops.

Συγκεκριμένα χρησιμοποιώντας **μετασχηματισμούς ομοιότητας** με τον πίνακα P_0 αλλάζουν μόνο οι γραμμές και στήλες 12 και 3.

Εάν για παράδειγμα ο πίνακας H είναι 6×6 τότε

$$P_0^\top H P_0 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ \delta & * & * & * & * & * \\ \delta & \delta & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix}, \quad P_0 = \begin{bmatrix} \hat{P}_0 & 0 \\ 0 & I_{n-3} \end{bmatrix}$$

$\hat{P}_0$ 3×3 Householder πίνακας

Hessenberg πίνακας
με "bulge"

Παρατηρούμε ότι οι θέσεις δ σχηματίζουν το "bulge".

B3: Στη συνέχεια η δημιουργία των πινάκων Householder είναι να επαναφέρουν τη μορφή $P_0^\top H P_0$ σε άνω Hessenberg μορφή. Αυτή η διαδικασία θα γίνει ως εξής

για το προηγούμενο παράδειγμα:

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ \beta & * & * & * & * & * \\ \beta & \beta & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} & \xrightarrow{P_1} & \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & \beta & * & * & * & * \\ 0 & \beta & \beta & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{bmatrix} \\
 \xrightarrow{P_2} \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & \beta & * & * & * \\ 0 & 0 & \beta & \beta & * & * \end{bmatrix} & \xrightarrow{P_3} & \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & \beta & * & * \\ 0 & 0 & 0 & \beta & * & * \end{bmatrix} \\
 & \xrightarrow{P_4} & \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & \beta & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & * \end{bmatrix}
 \end{array}$$

Παρατηρούμε ότι η γενική μορφή των πινάκων P_κ θα είναι:

$$P_\kappa = \text{diag}(I_\kappa, \hat{P}_\kappa, I_{n-\kappa-3}), \text{ όπου } \hat{P}_\kappa \text{ } 3 \times 3 \text{ πίνακας Householder}$$

Π.χ.

$$P_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Στον τελευταίο πίνακα P_{n-2} έχουμε μία διαφοροποίηση όπου $P_{n-2} = \text{diag}(I_{n-2}, \hat{P}_{n-2})$.

Στη συνέχεια περιγράφουμε αλγοριθμικά τον προσδιορισμό του πίνακα H_2 από τον πίνακα H . Για πρώτη φορά περιγράφηκε από το Francis (1961) και αναφερόμαστε στο B1, B2 και B3 σαν ένα Francis QR βήμα.

Αλγόριθμος Ένα επαναληπτικό βήμα του Double-Shift Implicit-Q αλγορίθμου (Francis-step) (1961)

Έστω H $n \times n$ unreduced upper Hessenberg πίνακας. Ο παρακάτω αλγόριθμος, που αποτελεί την εφαρμογή ενός βήματος Francis, παράγει ορθογώνιους πίνακες $P_0, P_1, \dots, P_{n-2}$ έτσι ώστε

$$Q^\top H Q, \text{ unreduced upper Hessenberg}$$

$$Q = P_0 P_1 \cdots P_{n-2}$$

Ο πίνακας H επικαλύπτεται από τον $Q^\top H Q$.

B1: Υπολογίστε τα shifts:

$$t = h_{n-1,n-1} + h_{nn}$$

$$d = h_{n-1,n-1}h_{nn} - h_{n,n-1}h_{n-1,n}$$

B2: Υπολογίστε τις πρώτες τρεις μη μηδενικές εισόδους τη πρώτης στήλης του πίνακα $M = H^2 - tH + dI$:

$$x = m_{11} = h_{11}^2 - th_{11} + d + h_{12}h_{21}$$

$$y = m_{21} = h_{21}(h_{11} + h_{12} - t)$$

$$z = m_{31} = h_{21}h_{32}$$

B3: Υπολογίστε πίνακες Householder $P_0, P_1, \dots, P_{n-2}$ έτσι ώστε ο τελικός πίνακας να είναι σε άνω Hessenberg μορφή

for $k = 0, 1, 2, \dots, n-3$

1. Προσδιορίστε πίνακα Householder $\hat{P}_k$:

$$\hat{P}_k \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad H = P_k H P_k^\top$$

$$P_k = \begin{bmatrix} I_k & & 0 \\ & \hat{P}_k & \\ 0 & & I_{n-k-3} \end{bmatrix}$$

Ενημέρωση των εισόδων x, y, z

$$x = h_{k+2,k+1}$$

$$y = h_{k+3,k+1}$$

$$z = h_{k+4,k+1} \text{ (if } k < n-3 \text{)}$$

2. Προσδιορίστε πίνακα Householder $\hat{P}_{n-2}$ τάξης 2 έτσι ώστε

$$\hat{P}_{n-2} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}$$

Διαμόρφωσε

$$P_{n-2} \begin{bmatrix} I_{n-2} & 0 \\ 0 & \hat{P}_{n-2} \end{bmatrix}$$

Πολυπλοκότητα: Κάθε Francis-step απαιτεί $6n^2$ flops. Εάν χρειάζεται και ο προσδιορισμός του πίνακα Q χρειάζονται επιπλέον $6n^2$ flops.

Παράδειγμα :

$$1. \ t = 2, \ d = 2, \ H = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}$$

$$2. \ x = n_{11} = 3, \ y = n_{21} = -1, \ z = n_{31} = -2$$

$$3. \ k = 0 :$$

$$P_0 = I - \frac{2uu^\top}{u^\top u}, \text{ όπου } u = \begin{pmatrix} 6.7417 \\ -1.0000 \\ -2.0000 \end{pmatrix}$$

$$P_0 = \begin{pmatrix} -0.8018 & 0.2673 & 0.5345 \\ 0.2673 & 0.9604 & -0.0793 \\ 0.5345 & -0.0793 & 0.8414 \end{pmatrix}, \text{ με } \text{eig}(H) = \left\{ \begin{matrix} -1.1663 \\ 2.0832 \pm 1.5874i \end{matrix} \right\}$$

$$H \equiv P_0^\top H P_0 = \begin{pmatrix} -0.8571 & -2.6248 & -0.9733 \\ 0.0581 & 0.8666 & 1.9505 \\ 1.1852 & -0.7221 & 2.9906 \end{pmatrix}$$

$$4. \text{ Ενημέρωσε } x \text{ και } y : x = h_{21} = 0.0581 \cdot y = h_{31} = 1.1852.$$

5. Βρες P_1 :

$$\hat{P}_1 = \begin{pmatrix} 0.0490 & -0.9988 \\ -0.9988 & 0.0490 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}_1 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1.1866 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0490 & -0.9988 \\ 0 & -0.9988 & 0.0490 \end{pmatrix}, \quad \begin{array}{l} \text{ίδια 1η στήλη με την πα-} \\ \text{ραγοντοποίηση QR του} \\ M \text{ (βλέπε προηγούμενο} \\ \text{παράδειγμα)} \end{array}$$

$$H \equiv P_1^\top H P_1 = \begin{pmatrix} -0.8571 & 1.1008 & 2.5740 \\ -1.1867 & 3.0456 & -0.8290 \\ 0 & 1.8436 & 0.8116 \end{pmatrix}$$

Παρατηρούμε ότι ο πίνακας H είναι ο ίδιος που προέκυψε και με την άμεση εφαρμογή του Explicit Double Shift (βλέπε προηγούμενο παράδειγμα).

Αλγόριθμος: Francis QR step

Έστω $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ανηγμένος άνω Hessenberg του οποίου ο κάτω δεξιά 2×2 κύριος υποπίνακας έχει ιδιοτιμές α_1 και α_2 . Ο παρακάτω αλγόριθμος επικαλύπτει τον πίνακα H με τον $Z^\top H Z$ όπου $Z = P_1 \cdots P_{n-2}$ γινόμενο πινάκων Householder και $\underbrace{Z^\top (H - \alpha_1 I) \cdot (H - \alpha_2 I)}_M$ είναι άνω τριγωνικός (επειδή $M = ZR$).

$$m := n - 1$$

$$s := h_{mm} + h_{nn}$$

$$t := h_{mm}h_{nn} - h_{mn}h_{nm}$$

$$x := h_{11}^2 + h_{12}h_{21} - sh_{11} + t$$

$$y := h_{21}(h_{11} + h_{22} - s)$$

$$z := h_{21}h_{32}$$

For $k = 0, \dots, n - 2$

 If $k < n - 2$

 then

 Καθόρισε πίνακα Householder $\bar{P}_k \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ τέτοιος ώστε

$$\bar{P}_k \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

$H := P_k H P_k^\top$, $P_k = \text{diag}(I_k, \bar{P}_k, I_{n-k-3})$
 else
 Καθόρισε πίνακα Householder $\bar{P}_{n-2} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ τέτοιος ώστε

$$\bar{P}_{n-2} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}.$$
 $H := P_{n-2} H P_{n-2}^\top$, $P_{n-2} = \text{diag}(I_{n-2}, \bar{P}_{n-2})$
 $x := h_{k+2, k+1}$
 $y := h_{k+3, k+1}$
 If $k < n - 3$ then $z := h_{k+4, k+1}$

Παρατήρηση:

Η αναγωγή ενός πίνακα A σε μορφή Hessenberg και κατόπιν η χρήση του Francis-QR step για τον προσδιορισμό της Schur πραγματικής μορφής είναι η standard μεθοδολογία για την επίλυση ενός πυκνού μη συμμετρικού προβλήματος ιδιοτιμών.

1.6 Ασκήσεις

Άσκηση 1

Δίνεται πίνακας $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ με την ιδιότητα $h_{ij} = 0$, $\forall i > j + 1$ (άνω Hessenberg).

(i) Χρησιμοποιώντας απαλοιφή Gauss, με μερική οδήγηση, να δοθεί αλγόριθμος άνω τριγωνοποίησης του H . Εκτιμήστε την πολυπλοκότητα.

(ii) Να αποδείξετε ότι $|h_{ij}^{(k)}| \leq k + 1$, αν $|h_{ij}| \leq 1$

(iii) Αν $|h_{ij}| \leq 1$, να υπολογίσετε το φράγμα του συντελεστή μεγέθυνσης. Τι συμπεραίνετε για την ευστάθεια της τριγωνοποίησης;

(iv) Να γίνει εφαρμογή του αλγορίθμου για τον πίνακα:

$$M = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 & 3 \\ 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix}.$$

Λύση 1. (i) Αλγόριθμος τριγωνοποίησης πίνακα άνω Hessenberg

```

for  k = 1, 2, ... , n - 1
  if  |hkk| < |hk+1,k| :
    Rowk  $\longleftrightarrow$  Rowk+1           Εναλλαγή γραμμών k, k + 1
  end
  mk =  $\frac{h_{k+1,k}}{h_{kk}}$ ,   hk+1,k = 0            $\rightarrow$  1flop
  for  j = k + 1, ... , n :
    hk+1,j = hk+1,j - mk · hkj            $\rightarrow$  1flop
  end
end

```

Πολυπλοκότητα : Στο k βήμα έχουμε $(n - k + 1)$ flops. Άρα συνολικά:
 $\sum_{k=1}^{n-1} (n - k + 1) = n(n - 1) - \frac{n(n-1)}{2} + (n - 1) = \frac{n^2}{2} + \frac{n}{2} - 1$
 $\approx \mathcal{O}\left(\frac{n^2}{2}\right)$ flops.

(ii)

$$|h_{ij}| \leq 1 \implies \left| h_{ij}^{(k)} \right| \leq k + 1,$$

$$h_{ij}^{(k)} = \begin{cases} 0 & i \geq k + 1, j = k \\ h_{ij}^{(k)} - m_{ik} h_{kj}^{(k)} & i = k + 1, j \geq k + 1 \\ h_{ij}^{(k)} & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

Θα αποδείξουμε επαγωγικά ότι ισχύει: $\left| h_{ij}^{(k)} \right| \leq k + 1$.

Για $k = 1 \implies |h_{ij}| \leq 1$.

Εστω ότι ισχύει για k , άρα $\left| h_{ij}^{(k)} \right| \leq k + 1$.

Θα δείξουμε ότι ισχύει για $k + 1$. Πράγματι έχουμε :

$$\begin{aligned} \left| h_{ij}^{(k+1)} \right| &\leq \left| h_{ij}^{(0)} - m_{ik} h_{kj}^{(k)} \right| \\ &\leq 1 + |m_{ik}| \left| h_{kj}^{(k)} \right| \\ &\leq 1 + |m_{ik}| (k + 1) = k + 2. \end{aligned}$$

(iii)

$$\rho = \frac{\max_{ijk} |h_{ij}^{(k)}|}{\max_{ij} |h_{ij}|} \leq k + 1, \quad \text{από το ερώτημα (ii)}$$

$$|h_{ij}| \leq 1 \Rightarrow \max_{ij} |h_{ij}| = 1 \rightarrow \text{Τριγωνοποίηση Hessenberg, ευσταθής}$$

(iv) Εφαρμογή του αλγορίθμου, ο οποίος περιγράφηκε στο ερώτημα (i) για τον πίνακα A που προκύπτει από αντιμετάθεση των γραμμών 1 και 2 του πίνακα M .

$$\begin{array}{ll}
A = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 6 & 3 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix} & \begin{array}{l} R_2 \rightarrow R_2 - m_{21} \cdot R_1 \\ m_{21} = 2/4 = 1/2 \\ \alpha_{22}^{(1)} = \alpha_{22} - m_{21} \alpha_{12} = 3/2 \\ \alpha_{23}^{(1)} = \alpha_{23} - m_{21} \alpha_{13} = 5 \\ \alpha_{24}^{(1)} = \alpha_{24} - m_{21} \alpha_{14} = 5/2 \end{array} \longrightarrow
\end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
A^{(1)} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & \frac{3}{2} & 5 & \frac{5}{2} \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix} & R_2 \longleftrightarrow R_3 \longrightarrow
\end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
A^{(1)} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & \mathbf{7} & 3 & 2 \\ 0 & \frac{3}{2} & 5 & \frac{5}{2} \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix} & \begin{array}{l} R_3 \rightarrow R_3 - m_{32} \cdot R_2 \\ m_{32} = 3/14 \\ \alpha_{33}^{(2)} = \alpha_{33}^{(1)} - m_{32} \alpha_{23}^{(1)} = 61/14 \\ \alpha_{34}^{(2)} = \alpha_{34}^{(1)} - m_{32} \alpha_{24}^{(1)} = 29/14 \end{array} \longrightarrow
\end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
A^{(2)} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & \frac{61}{14} & \frac{29}{14} \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix} & R_3 \longleftrightarrow R_4 \longrightarrow
\end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
A^{(2)} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & \mathbf{9} & 10 \\ 0 & 0 & \frac{61}{14} & \frac{29}{14} \end{pmatrix} & \begin{array}{l} R_4 \rightarrow R_4 - m_{43} \cdot R_3 \\ m_{43} = 61/126 \\ \alpha_{44}^{(3)} = \alpha_{44}^{(2)} - m_{43} \alpha_{34}^{(2)} = -349/126 \end{array} \longrightarrow
\end{array}$$

$$\begin{array}{ll}
A^{(3)} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{349}{126} \end{pmatrix} & \text{άνω τριγωνικός}
\end{array}$$

Άσκηση 2 Να αποδειχθεί ότι κατά τη διαδικασία του Double shift ισχύει ότι

$$Q_1(Q_1^*HQ_1 - \alpha_2I)R_1 = Q_1Q_2R_2R_1$$

Λύση 2. Παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned} H - \alpha_1I &= Q_1R_1 \Rightarrow \\ Q_1^*(H - \alpha_1I) &= R_1 \Rightarrow \\ Q_1^*H - \alpha_1Q_1^* &= R_1 \Rightarrow \\ Q_1^*HQ_1 - \alpha_1Q_1^*Q_1 &= R_1Q_1 \Rightarrow \\ Q_1^*HQ_1 &= \underbrace{R_1Q_1 + \alpha_1I}_{H_1} \end{aligned}$$

Όμως $H_1 - \alpha_2I = Q_2R_2$, οπότε προκύπτει το ζητούμενο.

Άσκηση 3 Να αποδειχθεί ότι κατά τη διαδικασία του Double shift ο πίνακας H_2 είναι ορθογώνια όμοιος με τον H και προκύπτει από αυτόν με πραγματικούς ορθογώνιους μετασχηματισμούς.

Λύση 3.

$$H_2 = R_2Q_2 + \alpha_2I$$

$$\begin{aligned} H_2 &= Q_2^*(Q_2R_2 + \alpha_2I)Q_2 \\ &= Q_2^*H_1Q_2 \\ &= Q_2^*(R_1Q_1 + \alpha_1I)Q_2 \\ &= Q_2^*Q_1^*(\underbrace{Q_1R_1 + \alpha_1I}_H)Q_1Q_2 \\ &= Q_2^*Q_1^*H \underbrace{Q_1Q_2}_Z \Rightarrow \end{aligned}$$

$$H_2 = Z^*HZ, \quad Z = Q_1Q_2 \text{ πραγματικά ορθογώνιος}$$

Άσκηση 4 Να αποδειχθεί ότι κατά τη διαδικασία του Double shift ο πίνακας H_2 είναι ορθογώνια όμοιος με τον H_1 .

Λύση 4.

$$H_2 = \underbrace{Q_2^\top(H_1 - \alpha_2I)}_{R_2}Q_2 + \alpha_2I = Q_2^\top H_1Q_2$$

ή

$$H_2 = Q_2^\top \underbrace{(Q_2R_2 + \alpha_2I)}_{H_1}Q_2$$

Άσκηση 5 Έστω $H = Q^*AQ \in \mathbb{R}^{m \times n}$ να είναι ένας ορθογώνιος άνω Hessenberg πίνακας χωρίς μηδενικά στην υποδιαγώνιο. Τότε οι στήλες 2 μέχρι m του Q ορίζονται μοναδικά (εκτός των προσήμων) από την πρώτη στήλη του (Implicit Q theorem).

Λύση 5. Έστω $Q^*AQ = H$ και $V^*AV = G$ με H και G άνω Hessenberg χωρίς μηδενικά στην υποδιαγώνιο και έστω $|v_1^*q_1| = 1$.

Δείξτε ότι V^*Q είναι μοναδιαίος και διαγώνιος.

Ως $W = V^*Q$, τότε $GW = GV^*Q = V^*AQ = V^*QH = WH$. Η i -οστή στήλη: $(GW)_p = (GW)_i = (WH)_i = \sum_{j=1}^{i+1} h_{ji}W_j$ οπότε $h_{i+1,i}W_{i+1} = G(W_i) - \sum_{j=1}^i h_{ji}W_j$ και ως $W_1 = w_{11}e_1$ με $w_{11} = v_1^*q_1$ έπεται ότι ο W_2 μπορεί μόνο να μην έχει μηδενικά στις πρώτες δύο εισόδους του. Επιπλέον, W είναι μοναδιαίος άρα $W_1 = w_{11}e_1$, $W_{12} = 0$ και $|W_{2ro2}| = 1$. Κάνοντας επαγωγή στο i δείχνουμε ότι W είναι μοναδιαίος και διαγώνιος.