Αριθμητική Ανάλυση

Κεφάλαιο 4. Αριθμητικός Υπολογισμός Ιδιοτιμών και Ιδιοδιανυσμάτων

Διδάσκων: Φ.Τζαφέρης

ΕΚΠΑ

18 Απριλίου 2024

Η μέθοδος του Jacobi

Η μέθοδος των δυνάμεων, σε συνδυασμό με τις διάφορες τεχνικές, χρησιμοποιείται συνήθως για τον προσδιορισμό μερικών ιδιοτιμών και των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων και αυτό γιατί η διαδοχική εφαρμογή της μεθόδου του υποβιβασμού(deflatiion)έχει σαν αποτέλεσμα την αύξηση των σφαλμάτων στρογγύλευσης.

Στη συνέχεια θα στρέψουμε το ενδιαφέρον μας σε εκείνες τις μεθόδους που βρίσκουν όλο το ιδιοσύστημα (ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα) ταυτόχρονα και όχι μετά από την εφαρμογή κάποιας τεχνικής διατάραξης. Οι μέθοδοι αυτές βασίζονται στους μετασχηματισμούς ομοιότητας για τον μετασχηματισμό του αρχικού πίνακα A σε έναν άλλο του οποίου το ιδιοσύστημα είναι εύκολο να υπολογισθεί.

Θεώρημα 1

Αν ένας πίνακας A έχει n γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα $x_1, x_2, \ldots, x_n$ που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ και αν $P = [x_1, x_2, \ldots, x_n]$, τότε ο P είναι μη ιδιάζων και

$$P^{-1}AP = D \tag{1}$$

όπου

$$D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & 0 \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \lambda_n \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Απόδειξη

Ο P είναι ένας πίνακας του οποίου οι στήλες είναι γραμμικά ανεξάρτητες, άρα ο P είναι μη ιδιάζων. Επίσης

$$\begin{aligned} AP &= A\left[x_1, x_2, \ldots, x_n\right] \\ &= \left[Ax_1, Ax_2, \ldots, Ax_n\right] \\ &= \left[\lambda_1 x_1, \lambda_2 x_2, \ldots, \lambda_n x_n\right] \\ &= \left[x_1, x_2, \ldots, x_n\right] \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & 0 \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \cdot & \\ 0 & & & & \lambda_n \end{bmatrix} \\ &= PD. \quad \square \end{aligned}$$

Αν τώρα περιοριστούμε σε Ερμιτιανούς ($A = A^H$) πίνακες τότε ισχύει το ακόλουθο θεώρημα

Θεώρημα 2

Αν ο A είναι ένας Ερμιτιανός πίνακας τάξης n, με ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ (όχι κατ΄ ανάγκη διακεκριμένες), τότε υπάρχει ένας μοναδιαίος (unitary) πίνακας P, τέτοιος ώστε

$$P^* A P = D \tag{3}$$

όπου D είναι ένας πραγματικός διαγώνιος πίνακας με διαγώνια στοιχεία τα $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$.

Από την (3) και επειδή ο P είναι μοναδιαίος ($P^* = P^{-1}$) έπεται ότι

$$AP = PD$$

πράγμα που σημαίνει ότι οι στήλες του P είναι ιδιοδιανύσματα του A. Είναι φυσικό λοιπόν να προσπαθήσουμε να δημιουργήσουμε τον πίνακα P χρησιμοποιώντας διαδοχικούς στοιχειώδεις μοναδιαίους μετασχηματισμούς. Πράγματι, στη συνέχεια κατασκευάζουμε μία προσέγγιση του P τέτοια ώστε ο πίνακας P^*AP να έχει τα εκτός της διαγωνίου του στοιχεία πολύ μικρά σε σύγκριση με τα διαγώνια στοιχεία του A. Έτσι η μέθοδός μας θα πρέπει να έχει σαν αποτέλεσμα την ελάπωση των εκτός της κυρίας διαγωνίου στοιχείων του πίνακα A. Στο σημείο αυτό είναι χρήσιμο να διατυπώσουμε το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 3

Αν ο πίνακας A είναι Ερμιτιανός, τότε ο πίνακας $B = P^* AP$ όπου P^* *μοναδιακός (unitary)* είναι Ερμιτιανός και έχει την ίδια Ευκλείδια norm με εκείνη του A, δηλαδή

$$\| B \|_E^2 = \| A \|_E^2 \tag{4}$$

όπου

$$\| A \|_E^2 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2 . \tag{5}$$

Απόδειξη

Παρατηρούμε ότι $B^* = B$. Επίσης

$$\begin{aligned} \| A \|_E^2 &= tr(A^* A) \\ &= tr(A^2) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 \end{aligned}$$

όπου λ_i είναι ιδιοτιμή του A. Επειδή όμως ο $B = P^* AP$ είναι όμοιος με τον A, πράγμα που σημαίνει ότι οι πίνακες A και B έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές, συνεπάγεται ότι η (4) ισχύει.□

Συνεπώς αν κατασκευάσουμε την ακολουθία των Ερμιτιανών πινάκων

$$\begin{aligned} A_1 &= A \\ A_2 &= P_1^* A_1 P_1 \\ &\vdots \\ A_{s+1} &= P_s^* A_s P_s \\ &\vdots \end{aligned} \tag{6}$$

από το Θεώρημα 3 συνεπάγεται ότι η Ευκλείδια norm του κάθε πίνακα A_s είναι ίση με εκείνη του $A_1 = A$.

Αλλά ο σκοπός μας είναι να ελαττωθεί το μέγεθος των εκτός της κυρίας διαγωνίου στοιχείων του A, χρησιμοποιώντας τους μετασχηματισμούς ομοιότητας. ´ρα αν ορίσουμε τις ποσότητες

$$E_{(s)} = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}} \left| a_{ij}^{(s)} \right|^2 \tag{7}$$

$$D_{(s)} = \sum_{i=1}^{n} \left| a_{ij}^{(s)} \right|^2 \tag{8}$$

και διαλέξουμε την ακολουθία $\left\{ P_{(s)} \right\}, \ s = 1, 2, \ldots$ στην (6) τέτοια ώστε

$$E_{(s+1)} \leq E_{(s)} \tag{9}$$

τότε

$$D_{(s+1)} \geq D_{(s)} \tag{10}$$

αφού $\| A_{s+1} \|_E = \| A_s \|_E$. Είναι φανερό λοιπόν ότι μεγιστοποιώντας την ποσότητα $D_{(s+1)} - D_{(s)}$ η ταχύτητα σύγκλισης της ακολουθίας $\left\{ A_s \right\}, \ s = 1, 2, \ldots$ θα είναι η μεγαλύτερη δυνατή.

Στη συνέχεια θα αναπτύξουμε τη μέθοδο του Jacobi (1846) η οποία μετασχηματίζει τον πίνακα A_1 σε διαγώνιο εκτελώντας μία ακολουθία από επίπεδες περιστροφές. Για λόγους ευκολίας θα υποθέσουμε ότι ο πίνακας A είναι πραγματικός και συμμετρικός οπότε ο P είναι ένας ορθογώνιος πίνακας και η (3) γράφεται σαν $P^T AP = D$ ενώ οι (6) μετασχηματίζονται στις

$$\begin{aligned}
A_1 &= A \\
A_2 &= P_1^T A_1 P_1 \\
A_3 &= P_2^T A_2 P_2 \\
\vdots & \quad \vdots \\
A_{s+1} &= P_s^T A_s P_s \\
\vdots & \quad \vdots
\end{aligned}$$

Αν επιλέξουμε σαν πίνακα P τον

$$
P = \begin{array}{c} \\ \\ \\ r \rightarrow \\ \\ \\ \\ q \rightarrow \\ \\ \\ \\ \end{array}
\begin{bmatrix}
1 & & & & \\
\ddots & & 0 & & \\
1 & & & & \\
 & \cos\theta & \cdots & \sin\theta & \\
 & & 1 & & \\
0 & \vdots & \ddots & \vdots & 0 \\
 & & 1 & & \\
 & -\sin\theta & \cdots & \cos\theta & \\
 & & & & 1 \\
 & & 0 & & \ddots \\
 & & & & 1
\end{bmatrix} \tag{11}
$$

Θεώρημα 4. (Μέθοδος Jacobi)

Αν ο A είναι ένας πραγματικός και συμμετρικός πίνακας τότε: (a) $P^T P = I$ (δηλαδή ο P είναι ορθογώνιος) (b) Αν $B = (b_{ij}) = P^T AP$, τότε ο B είναι συμμετρικός και

(i)

$$\text{Για } i \neq r, q \text{ και } j \neq r, q \quad b_{ij} = a_{ij} \tag{12}$$

(ii)

$$\text{Για } i \neq r, q \tag{13}$$

$$b_{ir} = b_{ri} = a_{ir} \cos\theta - a_{iq} \sin\theta$$

$$b_{iq} = b_{qi} = a_{ir} \sin\theta + a_{iq} cos\theta \tag{14}$$

$$\tag{15}$$

(iii)

$$b_{rr} = a_{rr} \cos^2\theta + a_{qq} \sin^2\theta - 2a_{rq} \sin\theta \cos\theta$$

$$b_{qq} = a_{rr} \sin^2\theta + a_{qq} \cos^2\theta + 2a_{rq} \sin\theta \cos\theta \tag{16}$$

(iv)

$$b_{rq} = b_{qr} = \frac{1}{2}(a_{rr} - a_{qq}) \sin 2\theta + a_{rq} \cos 2\theta. \tag{17}$$

Απόδειξη

(a) Έστω $P = [p_1, p_2, \ldots, p_n]$ τότε για $j \neq r, q$ έχουμε

$$p_j = e_j = [0, 0, \ldots, 0, \underset{\substack{\uparrow \\ j}}{1}, 0, \ldots 0]^T \quad \text{και για} \quad j = r, q$$

$$p_r = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \cos\theta \\ \vdots \\ -\sin\theta \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{array}{c} \\ \\ \\ \leftarrow \quad r \\ \\ \leftarrow \quad q \\ \\ \\ \end{array} \end{array} \qquad p_q = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \sin\theta \\ \vdots \\ \cos\theta \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{array}{c} \\ \\ \\ \leftarrow \quad r \\ \\ \leftarrow \quad q \\ \\ \\ \end{array} \end{array} \tag{18}$$

Επομένως

$$P^T P = \begin{bmatrix} p_1^T \\ p_2^T \\ \vdots \\ p_n^T \end{bmatrix} [p_1 \ p_2 \ldots p_n] = \begin{bmatrix} p_1^T p_1 & p_1^T p_2 & \ldots & p_1^T p_n \\ p_2^T p_1 & p_2^T p_2 & \ldots & p_2^T p_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ p_n^T p_1 & p_n^T p_2 & \ldots & p_n^T p_n \end{bmatrix}.$$

Το τυχόν στοιχείο στη θέση (i, j) του $P^T P$ είναι το $p_i^T p_j$. Επίσης για $i, j \neq r, q$ έχουμε

$$p_i^T p_j = e_i^T e_j = \begin{cases} 1, & \text{αν } i = j \\ 0, & \text{αν } i \neq j. \end{cases}$$

Για $i = r$ και $j \neq r, q$

$$p_i^T p_j = p_r^T e_j = 0.$$

Για $i = r$ και $j = r$

$$p_r^T p_r = \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1.$$

Όμοια για $i = q$ και $j = q$

$$p_q^T p_q = \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1.$$

Για $i = r$ και $j = q$

$$p_r^T p_q = \cos\theta\sin\theta - \sin\theta\cos\theta = 0.$$

Επειδή ο πίνακας $P^T P$ είναι συμμετρικός έχουμε ότι και $p_q^T p_r = 0$. ΄ρα απεδείχθη ότι για όλα τα i και j

$$p_i^T p_j = \begin{cases} 1 & \text{αν } i = j \\ 0 & \text{αν } i \neq j \end{cases}$$

δηλαδή $P^T P = I$ και ο P είναι ένας ορθογώνιος πίνακας.

(b) Θεωρούμε τον πίνακα A ως $A = [a_1, a_2, \dots, a_n]$ όπου $a_i = [a_{1i}, a_{2i}, \dots, a_{ni}]^T$. Τότε

$$B = P^T A P = \begin{bmatrix} p_1^T \\ p_2^T \\ \vdots \\ p_n^T \end{bmatrix} A [p_1 \; p_2 \; \dots \; p_n]$$

$$= \begin{bmatrix} p_1^T \\ p_2^T \\ \vdots \\ p_n^T \end{bmatrix} [Ap_1 \; Ap_2 \; \dots \; Ap_n] = \begin{bmatrix} p_1^T A p_1 & p_1^T A p_2 & \dots & p_1^T A p_n \\ p_2^T A p_1 & p_2^T A p_2 & \dots & p_2^T A p_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ p_n^T A p_1 & p_n^T A p_2 & \dots & p_n^T A p_n \end{bmatrix}.$$

Συνεπώς, $b_{ij} = p_i^T A p_j$ και διακρίνουμε πάλι τις προηγούμενες περιπτώσεις.

Για $i \neq r, q$ και $j \neq r, q$ έχουμε

$$b_{ij} = p_i^T A p_j = e_i^T A e_j = e_i^T a_j = a_{ij}.$$

Για $i \neq r, q$ και $j = r$

$$b_{ir} = p_i^T A p_r = e_i^T \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1r} & \dots & a_{1q} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ a_{r1} & \dots & a_{rr} & \dots & a_{rq} & \dots & a_{rn} \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ a_{q1} & \dots & a_{qr} & \dots & a_{qq} & \dots & a_{qn} \\ \vdots & & & & & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nr} & \dots & a_{nq} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{array}{c} \left[\begin{array}{c} 0 \\ \vdots \\ \cos\theta \\ \vdots \\ -\sin\theta \\ \vdots \\ 0 \end{array}\right] \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \leftarrow r \\ \\ \leftarrow q \\ \\ \\ \end{array}$$

$$= e_i^T \begin{bmatrix} a_{1r}\cos\theta - a_{1q}\sin\theta \\ a_{2r}\cos\theta - a_{2q}\sin\theta \\ \vdots \\ a_{nr}\cos\theta - a_{nq}\sin\theta \end{bmatrix} = a_{ir}\cos\theta - a_{iq}\sin\theta.$$

Για $i \neq r, q$ και $j = q$ έχουμε

$$b_{iq} = p_i^T A p_q = e_i^T \begin{bmatrix} a_{1r}\cos\theta + a_{1q}\sin\theta \\ a_{2r}\cos\theta + a_{2q}\sin\theta \\ \vdots \\ a_{nr}\cos\theta + a_{nq}\sin\theta \end{bmatrix} = a_{ir}\cos\theta + a_{iq}\sin\theta.$$

Για $i = j = r$ έχουμε

$$\begin{aligned} b_{rr} &= p_r^T A p_r = \begin{array}{ccccccc} & & r\downarrow & & q\downarrow & & \\ [0 & \dots & \cos\theta & \dots & -\sin\theta & \dots & 0] \end{array} \begin{bmatrix} a_{1r}\cos\theta - a_{1q}\sin\theta \\ a_{2r}\cos\theta - a_{2q}\sin\theta \\ \vdots \\ a_{nr}\cos\theta - a_{nq}\sin\theta \end{bmatrix} \\ &= a_{rr}\cos^2\theta - a_{rq}\cos\theta\sin\theta - a_{qr}\sin\theta\cos\theta + a_{qq}\sin^2\theta. \\ &= a_{rr}\cos^2\theta - 2a_{rq}\cos\theta\sin\theta + a_{qq}\sin^2\theta \qquad (a_{rq} = a_{qr}). \end{aligned}$$

Για $i = j = q$ έχουμε

$$b_{qq} = p_q^T A p_q = \begin{array}{c} \\ [0 \end{array} \begin{array}{ccccc} & {}^{r\downarrow} & & {}^{q\downarrow} & \\ \dots & \sin\theta & \dots & \cos\theta & \dots \end{array} \begin{array}{c} \\ 0] \end{array} \begin{bmatrix} a_{1r}\sin\theta + a_{1q}\cos\theta \\ a_{2r}\sin\theta + a_{2q}\cos\theta \\ \vdots \\ a_{nr}\sin\theta + a_{nq}\cos\theta \end{bmatrix}$$

$$= a_{rr}\sin^2\theta + a_{rq}\cos\theta\sin\theta + a_{qr}\sin\theta\cos\theta + a_{qq}\cos^2\theta$$

$$= a_{rr}\sin^2\theta + 2a_{rq}\cos\theta\sin\theta + a_{qq}\cos^2\theta.$$

Για $i = r$ και $j = q$ έχουμε

$$b_{rq} = p_r^T A p_q = \begin{array}{c} \\ [0 \end{array} \begin{array}{ccccc} & {}^{r\downarrow} & & {}^{q\downarrow} & \\ \dots & \cos\theta & \dots & -\sin\theta & \dots \end{array} \begin{array}{c} \\ 0] \end{array} \begin{bmatrix} a_{1r}\sin\theta + a_{1q}\cos\theta \\ a_{2r}\sin\theta + a_{2q}\cos\theta \\ \vdots \\ a_{nr}\sin\theta + a_{nq}\cos\theta \end{bmatrix}$$

$$= a_{rr}\cos\theta\sin\theta + a_{rq}\cos^2\theta - a_{qr}\sin^2\theta - a_{qq}\cos\theta\sin\theta.$$

$$= 1/2(a_{rr} - a_{qq})\sin 2\theta + a_{rq}\cos 2\theta.$$

Παρατηρούμε τώρα ότι ο B είναι συμμετρικός, και συνεπώς η απόδειξη του (b) είναι πλήρης. $\square$

Ο ορθογώνιος πίνακας P που ορίσθηκε από την (12) καλείται *πίνακας επίπεδης περιστροφής* καθόσον περιστρέφει τους άξονες r και q κατά μία γωνία θ.

Η κλασική μέθοδος του Jacobi σαρώνει τα στοιχεία του πίνακα A_s της ακολουθίας (11) που βρίσκονται πάνω από την κύρια διαγώνιο και προσδιορίζει το στοιχείο $a_{rq}^{(s)}$ με τη μεγαλύτερη απόλυτο τιμή, το οποίο καλείται οδηγό στοιχείο. Η αναζήτηση αυτή γίνεται μόνο στο άνω τριγωνικό τμήμα του A_s αφού είναι συμμετρικός.

Στη συνέχεια η γωνία περιστροφής θ_s εκλέγεται έτσι ώστε το στοιχείο $a_{rq}^{(s+1)}$ να είναι μηδέν. Αν λοιπόν απαιτήσουμε $b_{rq} = 0$, τότε από την (17) έχουμε

$$b_{rq} = \frac{1}{2}(a_{rr} - a_{qq}) \sin 2\theta + a_{rq} \cos 2\theta = 0$$

ή

$$\tan 2\theta = \frac{2a_{rq}}{a_{qq} - a_{rr}}, \quad a_{qq} - a_{rr} \neq 0. \tag{19}$$

Η γωνία θ εκλέγεται έτσι ώστε

$$-\frac{\pi}{4} \leq \theta \leq \frac{\pi}{4}.$$

Αν $a_{qq} - a_{rr} = 0$ τότε $a_{rq} \cos\theta = 0$ και $\theta = \pi/4$.

Στην περίπτωση όπου $a_{rq} = 0$ δεν χρειάζεται καμία περιστροφή ενώ ο A_s θα είναι ήδη διαγώνιος. ΄ρα υπάρχει πάντα μία γωνία θ τέτοια ώστε $b_{rq} = b_{qr} = 0$. Δεν χρειάζεται όμως να λύσουμε την τριγωνομετρική εξίσωση (19) προκειμένου να βρούμε την θ καθόσον χρειαζόμαστε μόνο τα $\sin\theta$ και $\cos\theta$. Έτσι αν θέσουμε

$$\beta = |a_{qq} - a_{rr}| \;\; \text{και} \;\; a = 2a_{rq}\text{sign}(a_{qq} - a_{rr}) \tag{20}$$

όπου

$$signx = \frac{x}{|x|} = \begin{cases} 1, & \text{αν } x > 0 \\ -1, & \text{αν } x < 0 \end{cases}$$

τότε η (17) γράφεται ως εξής

$$\tan 2\theta = \frac{\alpha}{\beta}.$$

Για τον υπολογισμό του $\cos\theta$ έχουμε $\sec^2 2\theta = 1 + \tan^2 2\theta$ ή

$$\sec^2 2\theta = 1 + \frac{\alpha^2}{\beta^2}$$

άρα

$$\cos^2 2\theta = \frac{\beta^2}{\alpha^2 + \beta^2}.$$

Επειδή $|\theta| \leq \pi/4$ διαλέγουμε το $\cos 2\theta$ να είναι θετικό, έτσι

$$\cos 2\theta = \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}.$$

Επίσης εύκολα βρίσκουμε ότι

$$\sin 2\theta = \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}.$$

Από την $\cos 2\theta = 2\cos^2\theta - 1$ έχουμε τελικά ότι

$$\cos\theta = \left[\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}\right)\right]^{1/2} \tag{21}$$

ενώ από την $\sin 2\theta = 2\cos\theta\sin\theta$ λαμβάνουμε

$$\sin\theta = \frac{\alpha}{2\cos\theta\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}. \tag{22}$$

Αλγόριθμος της κλασικής μεθόδου του Jacobi

1. Προσδιορισμός των r και q τέτοιων ώστε

$$a_{rq}^{(s)} = \max_{1 \le i,j \le n} \left| a_{ij}^{(s)} \right| .$$

2. Υπολογισμός των α και β από την (20)
3. Υπολογισμός των $\cos\theta$ και $\sin\theta$ από τις (21) και (22).
4. Υπολογισμός του A_{s+1} χρησιμοποιώντας τις (12), (13) και (16). Αντί της (17) το βήμα 4 ολοκληρώνεται θέτοντας $a_{rq}^{(s+1)} = a_{qr}^{(s+1)} = 0$. Θα πρέπει ωστόσο να χρησιμοποιηθεί η (17) σαν υπολογιστικός έλεγχος μαζί με έναν έλεγχο του μεγέθους της ποσότητας $|\sin^2\theta + \cos^2\theta - 1|$.
5. Ο σχηματισμός της ακολουθίας των A_s θα σταματήσει όταν $E_{(s)} \le \varepsilon, \varepsilon > 0$, γιατί στη φάση αυτή τα διαγώνια στοιχεία του A_s είναι καλές προσεγγίσεις των ιδιοτιμών $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$.

Με βάση τις σχέσεις του Θεωρήματος 3 αποδεικνύεται ότι

$$E_{(s+1)} = E_{(s)} - 2(a_{rq}^{(s)})^2 \tag{23}$$

το οποίο δίνει

$$D_{(s+1)} = D_{(s)} + 2(a_{rq}^{(s)})^2 \tag{24}$$

πράγμα που αποδεικνύει ότι η ακολουθία των πινάκων A_s συγκλίνει σε διαγώνιο μορφή και τελικά ο πίνακας A_s θα είναι ουσιαστικά ένας διαγώνιος πίνακας. Θα πρέπει όμως να δειχθεί ότι η ακολουθία τείνει σε ένα σταθερό διαγώνιο πίνακα. Δηλαδή θα πρέπει να δειχθεί ότι

$$|a_{rr}^{(s+1)} - a_{rr}^{(s)}| \to 0$$

για $s \to \infty$. Επίσης έχουμε ότι

$$\begin{aligned} a_{rr}^{(s+1)} - a_{rr}^{(s)} &= -a_{rr}^{(s)}(1-\cos^2\theta) - 2a_{rq}^{(s)}\cos\theta\sin\theta + a_{qq}^{(s)}\sin^2\theta \\ &= (a_{qq}^{(s)} - a_{rr}^{(s)})\sin^2\theta - 2a_{rq}^{(s)}\cos\theta\sin\theta. \end{aligned}$$

Αν $a_{qq}^{(s)} - a_{rr}^{(s)} = 0$ έχουμε αμέσως ότι

$$|a_{rr}^{(s+1)} - a_{rr}^{(s)}| > |a_{rq}^{(s)}|$$

αφού $|\theta| = \pi/4$. Αν $a_{qq}^{(s)} - a_{rr}^{(s)} \neq 0$ τότε χρησιμοποιώντας την (19) και απλές τριγωνομετρικές σχέσεις βρίσκουμε

$$|a_{rr}^{(s+1)} - a_{rr}^{(s)}| = |a_{rq}^{(s)}|\,|\tan\theta|.$$

Αλλά $|\theta| \leq \pi/4$ και συνεπώς γενικά

$$|a_{rr}^{(s+1)} - a_{rr}^{(s)}| \leq |a_{rq}^{(s)}|.$$

Αν είμαστε στη φάση όπου $|a_{rq}^{(s+1)}| \leq \varepsilon$ τότε και

$$|a_{rr}^{(s+1)} - a_{rr}^{(s)}| \leq \varepsilon.$$

όμοια

$$|a_{qq}^{(s+1)} - a_{qq}^{(s)}| \leq \varepsilon.$$

Συνεπώς ο αλγόριθμος του Jacobi δημιουργεί μία ακολουθία πινάκων οι οποίοι τείνουν σε ένα σταθερό διαγώνιο πίνακα, ο οποίος είναι όμοιος με τον αρχικό. Αποδεικνύεται ότι η μέθοδος είναι και ευσταθής.

Παραλλαγές της μεθόδου του Jacobi

Επειδή η αναζήτηση, σε κάθε βήμα του αλγορίθμου, για το στοιχείο a_{rq} με το μέγιστο μέτρο είναι χρονοβόρα, γιαυτό υπάρχουν δύο εναλλακτικές στρατηγικές που είναι περισσότερο χρήσιμες στην πράξη.

Κυκλική μέθοδος Jacobi

Η πρώτη είναι εκείνη κατά την οποία δεν γίνεται καμία αναζήτηση. Τα στοιχεία μηδενίζονται σύμφωνα με μία κυκλική σειρά. Η συνηθισμένη σειρά είναι εκείνη των γραμμών, δηλαδή μηδενίζονται τα στοιχεία στις θέσεις $(1,2), (1,3), \ldots, (1,n), (2,3), (2,4), \ldots, (2,n), (3,4), \ldots, (n-1,n)$. Σε κάθε βήμα ελέγχεται αν το στοιχείο που πρόκειται να μηδενισθεί είναι μεγάλο σε μέγεθος συγκρινόμενο με το άθροισμα των τετραγώνων των διαγωνίων στοιχείων.

Μέθοδος του *Jacobi με φράγμα(threshold)*

Ορίζεται ένα φράγμα (threshold) κατά τη διάρκεια κάθε βήματος. Αν το υποψήφιο για μηδενισμό στοιχείο του πίνακα είναι μικρότερο από το φράγμα αυτό κατά απόλυτο τιμή, τότε αγνοείται (διαφορετικά μηδενίζεται). Φυσικά, το φράγμα αυτό ελαπώνεται σε κάθε βήμα. Επειδή η ποσότητα $E_{(s)}$ τείνει στο μηδέν, θα χρειαστεί το φράγμα να γίνει τελικά ένας αριθμός πολύ κοντά στο μικρότερο αριθμό που μπορεί να παρασταθεί από τον υπολογιστή που χρησιμοποιείται. Στην περίπτωση αυτή μπορούμε να υποθέσουμε ότι η μέθοδος έχει συγκλίνει.

Είναι δυνατόν να αποδειχθεί ότι για τις παραπάνω τρεις μεθόδους του Jacobi η σύγκλιση είναι τετραγωνική με την έννοια ότι

$$E_{(s+N)} \leq K[E_{(s)}]^2$$

όπου το K εξαρτάται από την απόσταση των ιδιοτιμών και την τάξη n του πίνακα A και $N = (1/2)n(n-1)$. Αποδεικνύεται επίσης ότι η μεγίστη τιμή της ποσότητας $D_{(s+1)} - D_{(s)}$ λαμβάνεται όταν ισχύει η (19) (γιατί;).

Παράδειγμα

Εφαρμόστε τρία βήματα της μεθόδου του Jacobi στον πίνακα

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

Λύση

Βήμα 1. Το πρώτο μεγαλύτερο κατ' απόλυτη τιμή στοιχείο που συναντάται κατά τη σάρωση κατά γραμμές βρίσκεται στη θέση (1,3) άρα $r = 1$ και $q = 3$. Συνεπώς $a_{qq} = a_{33} = 1,\ a_{rr} = a_{11} = 1$ και επειδή $\left|a_{qq} - a_{rr}\right| = \left|1 - 1\right| = 0$ έχουμε $\theta = \frac{\pi}{4}$ οπότε $\cos\theta = \frac{\sqrt{2}}{2}$ και $\sin\theta = \frac{\sqrt{2}}{2}$. Από την (12) για $i, j \neq 1, 3$ ή για $i = j = 2$ έχουμε ότι $b_{22} = a_{22} = 2$ και από την (13) για $i = 2$ έχουμε

$$b_{21} = b_{12} = a_{21}\cos\theta - a_{23}\sin\theta = 0 \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} - 1 \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} \equiv -0.7071$$

$$b_{23} = b_{32} = a_{21}\sin\theta + a_{23}\cos\theta = 0 \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} + 1 \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} \equiv 0.7071.$$

Επίσης από την (16) έχουμε

$$\begin{aligned} b_{11} &= a_{11}\cos^2\theta + a_{33}\sin^2\theta - 2a_{13}\sin\theta\cos\theta \\ &= 1\cdot\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 + 1\cdot\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 - 2\cdot 2\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}\cdot\frac{\sqrt{2}}{2} = 3 \\ b_{33} &= a_{11}\sin^2\theta + a_{33}\cos^2\theta + 2a_{13}\sin\theta\cos\theta \\ &= 1\cdot\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 + 1\cdot\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 + 2\cdot 2\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}\cdot\frac{\sqrt{2}}{2} = -1. \end{aligned}$$

Τελικά αν $A_1 = A$ τότε

$$A_2 = \begin{bmatrix} -1 & -0.7071 & 0 \\ -0.7071 & 2 & 0.7071 \\ 0 & 0.7071 & 3 \end{bmatrix}.$$

Βήμα 2. Το πρώτο μεγαλύτερο κατ' απόλυτη τιμή στοιχείο που συναντάται κατά τη σάρωση κατά γραμμές βρίσκεται στη θέση (1,2) άρα $r = 1$ και $q = 2$. Συνεπώς
$a_{qq} = a_{22} = 2,\ a_{rr} = a_{11} = -1$. Επομένως, έχουμε

$$\beta = |a_{qq} - a_{rr}| = |2 + 1| = 3$$

και

$$\alpha = 2a_{12} sign(a_{qq} - a_{rr}) = 2\cdot(-0.7071)\cdot 1 \equiv -1.4142.$$

΄ρα

$$\cos\theta = \left[\frac{1}{2}\left(1+\frac{\beta}{\sqrt{\alpha^2+\beta^2}}\right)\right]^{1/2} = \left[\frac{1}{2}\left(1+\frac{3}{\sqrt{(-1.4142)^2+3^2}}\right)\right]^{1/2} = 0.9758$$

$$\sin\theta = \frac{\alpha}{2\cos\theta\sqrt{\alpha^2+\beta^2}} = \frac{-1.4142}{2\cdot 0.9758\sqrt{(-1.4142)^2+3^2}} = -0.2184.$$

Από την (12) για $i=j=3$ έχουμε ότι $b_{33}=a_{33}=3$ και από την (13) για $i=3$ έχουμε

$$b_{31} = b_{13} = a_{31}\cos\theta - a_{32}\sin\theta = 0\cdot 0.9758 - 0.7071\cdot(-0.2184) \equiv 0.1544$$
$$b_{32} = b_{23} = a_{31}\sin\theta + a_{32}\cos\theta = 0\cdot(-0.2184) + 0.7071\cdot 0.9758 \equiv 0.6899.$$

Επίσης από την (16) έχουμε

$$\begin{aligned}
b_{11} &= a_{11}\cos^2\theta + a_{22}\sin^2\theta - 2a_{12}\sin\theta\cos\theta \\
&= -1\cdot 0.9758^2 + 2\cdot(-0.2184)^2 - 2\cdot(-0.7071)\cdot(-0.2184)\cdot 0.9758 \\
&= -1.1581 \\
b_{22} &= a_{11}\sin^2\theta + a_{22}\cos^2\theta + 2a_{12}\sin\theta\cos\theta \\
&= -1\cdot(-0.2184)^2 + 2\cdot(0.9758)^2 + 2\cdot(-0.7071)\cdot(-0.2184)\cdot 0.9758 \\
&= 2.1581.
\end{aligned}$$

Επομένως

$$A_3 = \begin{bmatrix} -1.1581 & 0 & 0.1544 \\ 0 & 2.1581 & 0.6899 \\ 0.1544 & 0.6899 & 3 \end{bmatrix}.$$

Βήμα 3. $r = 2,\ q = 3,\ \beta = 0.8419,\ \alpha = 1.3799, \cos\theta = 0.8720,$ $\sin\theta = 0.4895$ και

$$A_4 = \begin{bmatrix} -1.1581 & -0.0756 & 0.1344 \\ -0.0756 & 3.2083 & 0 \\ 0.1344 & 0 & 7.9495 \end{bmatrix}.$$

Υπολογισμός των ιδιοδιανυσμάτων

Είναι φανερό ότι

$$A_{s+1} = (P_1P_2 \ldots P_s)^T A_1 (P_1P_2 \ldots P_s)$$

και στην περίπτωση όπου η μέθοδος έχει συγκλίνει, έχουμε ότι

$$P^T A_1 P = D \tag{25}$$

όπου

$$P = P_1P_2 \ldots P_s. \tag{26}$$

Συνεπώς από την (25) έχουμε ότι οι στήλες του P δίνουν τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα A. Αξίζει να σημειωθεί ότι τα ιδιοδιανύσματα προσδιορίζονται στη μέθοδο του Jacobi ταυτόχρονα με τις ιδιοτιμές. Επίσης τα ιδιοδιανύσματα που δίνονται από τον P είναι ορθογώνια. Στην περίπτωση όπου οι ιδιοτιμές του A είναι πλησίον η μία με την άλλη, υπάρχει πιθανότητα τα ιδιοδιανύσματα να μην υπολογισθούν με μεγάλη ακρίβεια. Το γεγονός ότι, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του Jacobi, μπορούμε πάντα να προσδιορίσουμε όλα τα ιδιοδιανύσματα είναι ένα σημαντικό πλεονέκτημα της μεθόδου. Ωστόσο, στη συνέχεια θα παρουσιαστούν ορισμένες ταχύτερες μέθοδοι, ιδιαίτερα όταν οι ιδιοτιμές είναι διακεκριμένες.

Η μέθοδος του Givens

Ένα βασικό μειονέκτημα της μεθόδου του Jacobi είναι ότι τα στοιχεία του πίνακα που μηδενίζονται σε ένα βήμα μπορεί να γίνουν μη μηδενικά (με αρκετά μεγάλη τιμή) στα επόμενα βήματα. Το φαινόμενο αυτό έχει σαν συνέπεια η μέθοδος του Jacobi να είναι μη πεπερασμένη. Έτσι όταν απαιτείται μεγάλη ακρίβεια για τις ιδιοτιμές ή όταν τα διαγώνια στοιχεία του A δεν είναι μεγάλα σε μέγεθος, συγκρινόμενα με τα εκτός της διαγωνίου στοιχεία του A, είναι δυνατόν να έχουμε πάρα πολύ αργή σύγκλιση της μεθόδου. Επίσης, συνήθως επιθυμούμε μόνο τον υπολογισμό των ιδιοτιμών και όχι των ιδιοδιανυσμάτων.

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε μεθόδους, οι οποίες μετασχηματίζουν ένα Ερμιτιανό πίνακα A σε έναν άλλο, του οποίου το ιδιοσύστημα είναι εύκολο να υπολογιστεί. Πιο συγκεκριμένα ο αρχικός πίνακας θα μετασχηματιστεί σε ένα πραγματικό συμμετρικό τριδιαγώνιο πίνακα με ένα πεπερασμένο αριθμό βημάτων.

Η μέθοδος του Givens

Προκειμένου να αποφευχθεί το βασικό μειονέκτημα της μεθόδου του Jacobi, ο Givens (1954) ανέπτυξε μία μέθοδο, η οποία διατηρεί τα μηδενικά στοιχεία στις εκτός της διαγωνίου θέσεις από την στιγμή που θα δημιουργηθούν.

1ο βήμα

Η μέθοδος αυτή ξεκινά με την εκλογή των $a_{23}, a_{24}, \ldots, a_{2n}$ σαν οδηγά στοιχεία αλλά αντί να επιλεγεί η γωνία θ τέτοια ώστε να μηδενίζονται τα στοιχεία αυτά (όπως στη μέθοδο Jacobi), η γωνία θ επιλέγεται έτσι ώστε να μηδενίζονται τα στοιχεία $a_{13}, a_{14}, \ldots, a_{1n}$ (και τα συμμετρικά τους). Κατ΄ αυτό τον τρόπο ένας συμμετρικός πίνακας A μετασχηματίζεται στον συμμετρικό πίνακα της μορφής

$$\left|\begin{array}{c|cccccc}
x & x & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\
\hline
x & x & x & \underline{x} & \underline{x} & \ldots & \underline{x} \\
0 & x & x & x & x & \ldots & x \\
0 & \underline{x} & x & x & x & \ldots & x \\
0 & \underline{x} & x & x & x & \ldots & x \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
0 & x & x & x & x & & x
\end{array}\right|$$

2ο βήμα

Εκλέγοντας στη συνέχεια σαν οδηγά στοιχεία από την τρίτη γραμμή (στήλη) που βρίσκονται στις θέσεις $(3,4),(3,5),\ldots(3,n)$ και τη γωνία περιστροφής θ έτσι ώστε να μηδενίζονται τα στοιχεία στις θέσεις που έχουν υπογραμμιστεί, δηλαδή στις $(2,4),(2,5),\ldots,(2,n)$, παράγεται ο πίνακας

$$\left|\begin{array}{cc|ccccc} x & x & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ x & x & x & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \hline 0 & x & x & x & x & \ldots & x \\ 0 & 0 & x & x & x & \ldots & x \\ 0 & 0 & x & x & x & \ldots & x \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & x & x & x & \ldots & x \end{array}\right|$$

ο οποίος έχει $n-3$ μηδενικά στη δεύτερη γραμμή και στη δεύτερη στήλη. Παρατηρούμε ότι τα μηδενικά της πρώτης γραμμής και της πρώτης στήλης θα διατηρηθούν αφού αυτά αντικαθίστανται από γραμμικούς συνδυασμούς μηδενικών (βλ. (13)).

r-βήμα

Γενικά το r κύριο βήμα της όλης διαδικασίας αποτελείται από $n-r-1$ επί μέρους βήματα, κατά τα οποία δημιουργούνται μηδενικά διαδοχικά στις θέσεις $r+2, r+3, \ldots, n$ της r γραμμής και στήλης και το μηδέν στην $(r-1, q)$ θέση παράγεται εκλέγοντας σαν οδηγό στοιχείο εκείνο της θέσης (r, q).
Συνεχίζοντας αυτή τη διαδικασία η μέθοδος θα μετασχηματίσει τον αρχικό πίνακα σε ένα συμμετρικό τριδιαγώνιο μετά από $\sum_{i=1}^{n-2}(n-i-1) = (n-1)(n-2)/2$ περιστροφές, πράγμα που δείχνει ότι η μέθοδος Givens απαιτεί πεπερασμένο πλήθος βημάτων. Είναι φανερό λοιπόν ότι οι υπολογισμοί στη μέθοδο του Givens έχουν διαταχθεί κατά τέτοιο τρόπο ώστε να μπορούμε να μηδενίσουμε στοιχεία εκτός της κύριας διαγωνίου, ενώ την ίδια στιγμή να παραμένουν μηδενικά τα προηγούμενα (μηδενικά) στοιχεία του πίνακα.

Χρησιμοποιώντας λοιπόν τον πίνακα P_s όπως ορίστηκε στη μέθοδο Jacobi μπορούμε να μηδενίσουμε αντί του $a_{rq}^{(s+1)}$ το στοιχείο $a_{r-1,q}^{(s+1)}$ (και το $a_{q,r-1}^{(s+1)}$). Αυτό μπορεί να γίνει αν θέσουμε $i = r - 1$ στη δεύτερη σχέση της (12) οπότε

$$b_{r-1,q} = b_{q,r-1} = a_{r-1,r} \sin\theta + a_{r-1,q} \cos\theta = 0 \tag{27}$$

η οποία ικανοποιείται αν

$$\sin\theta = -\alpha a_{r-1,q} \text{ και } \cos\theta = \alpha a_{r-1,r} \tag{28}$$

όπου

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{a_{r-1,r}^2 + a_{r-1,q}^2}}. \tag{29}$$

Για την παραγωγή ενός τριδιαγώνιου πίνακα οι τιμές των r και q είναι $2 \leq r \leq n-1$ και $r+1 \leq q \leq n$. Τέλος, μπορεί να υπολογιστεί ότι περίπου $4/3n^3$ πολλαπλασιασμοί χρειάζονται για να γίνει η τριγωνοποίηση σε σύγκριση με $2n^3$ πολλαπλασιασμούς για ένα βήμα της μεθόδου Jacobi.

Παράδειγμα

Να μετατραπεί ο πίνακας

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

σε τριδιαγώνιο με τη μέθοδο Givens.

Λύση

Καταρχήν

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{a_{1,2}^2 + a_{1,3}^2}} = \frac{1}{\sqrt{5}}, \ \sin\theta = -\frac{1}{\sqrt{5}}, \ \cos\theta = \frac{2}{\sqrt{5}}.$$

Από την (12) και για $i = 1, 2, 3$ έχουμε

$$b_{1,2} = a_{12}\cos\theta - a_{13}\sin\theta = 2\cdot\frac{2}{\sqrt{5}} - 1\left(-1\frac{1}{\sqrt{5}}\right) = \frac{5}{\sqrt{5}} = b_{12}$$

$$b_{2,4} = b_{4,2} = a_{42}\cos\theta - a_{43}\sin\theta = 1\cdot\left(\frac{2}{\sqrt{5}}\right) - 1\left(-\frac{1}{\sqrt{5}}\right) = \frac{3}{\sqrt{5}}$$

$$b_{34} = b_{4,3} = a_{42}\sin\theta + a_{43}\cos\theta = 1\cdot\left(-\frac{1}{\sqrt{5}}\right) + 1\cdot\left(\frac{2}{\sqrt{5}}\right) = \frac{1}{\sqrt{5}}.$$

Οι (16) και (17) για $r = 2$ και $q = 3$ δίνουν

$$b_{22} = a_{22}\cos^2\theta + a_{33}\sin^2\theta - 2a_{23}\sin\theta\cos\theta = 1$$

$$b_{33} = a_{22}\sin^2\theta + a_{33}\cos^2\theta + 2a_{23}\sin\theta\cos\theta = 2$$

$$\begin{aligned} b_{23} &= b_{32} = \frac{1}{2}(a_{22} \cdot a_{33})\sin 2\theta + a_{23}\cos 2\theta = \\ &= \frac{1}{2}(2-1)\left(-\frac{4}{5}\right) + (-1)\left(\frac{3}{5}\right) = -1. \end{aligned}$$

Οι υπόλοιποι υπολογισμοί αφήνονται σαν άσκηση για τον αναγνώστη.

Η μέθοδος του Householder

- Ο Householder (1958) ανέπτυξε μία μέθοδο, η οποία τριδιαγωνοποιεί ένα συμμετρικό πίνακα A χρησιμοποιώντας ακριβώς $n-2$ ορθογώνιους μετασχηματισμούς ομοιότητας.
- Αυτοί οι μετασχηματισμοί είναι πιο πολύπλοκοι από εκείνους της απλής περιστροφής αλλά η πλήρης τριδιαγωνοποίηση του πίνακα απαιτεί μόνο περίπου τους μισούς υπολογισμούς σε σύγκριση με τη μέθοδο του Givens.
- Ο μετασχηματισμός του Householder χρησιμοποιεί τους πίνακες

$$P \in R^{n\times n}$$

της μορφής

$$P = I - 2ww^T \tag{30}$$

όπου $w = (w_i) \in R^n$ είναι ένα διάνυσμα στήλη τέτοιο ώστε

$$w^T w = 1 \tag{31}$$

ή

$$w_1^2 + w_2^2 + \cdots + w_n^2 = 1.$$

Θεώρημα 1.

Αν ο πίνακας P ορισθεί από τις (30) και(31), τότε

(i) $P = P^T$

(ii) $P = P^{-1}$.

Απόδειξη

$$
\begin{aligned}
\text{(i) } P^T &= I - 2(ww^T)^T = I - 2ww^T = P \\
\text{(ii) } P^T P = P^2 &= (I - 2ww^T)(I - 2ww^T) \\
&= I - 4ww^T + 4w(w^T w)w^T \\
&= I - 4ww^T + 4ww^T \\
&= I. \ \square
\end{aligned}
$$

ʼρα $P = P^T = P^{-1}$ και συνεπώς ο P είναι συμμετρικός και ορθογώνιος.

Στη συνέχεια ας θεωρήσουμε $n-2$ μετασχηματισμούς Householder αρχίζοντας με τον συμμετρικό πίνακα $A \in R^{n\times n}$. Έχουμε

$$\begin{aligned} A_1 &= A \\ A_2 &= P_2 A_1 P_2 \\ A_3 &= P_3 A_2 P_3 \\ &\vdots \\ A_{n-1} &= P_{n-1} A_{n-2} P_{n-1} \end{aligned} \tag{32}$$

όπου οι πίνακες

$$P_r, \quad r = 2, 3, \ldots, n-1$$

ορίζονται από την

$$P_r = I - 2w^{(r)} w^{(r)^T} \tag{33}$$

με

$$w^{(r)} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ w_r \\ w_{r+1} \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} \tag{34}$$

και

$$w_r^2 + w_{r+1}^2 + \cdots + w_n^2 = 1. \tag{35}$$

Ο σκοπός μας είναι να μετασχηματίσουμε τον πραγματικό συμμετρικό πίνακα A_1 σε ένα πραγματικό συμμετρικό τριδιαγώνιο πίνακα A_{n-1} χρησιμοποιώντας $n-2$ ορθογώνιους μετασχηματισμούς ομοιότητας.

Προκειμένου να υπολογίσουμε τον

$$A_r = P_r A_{r-1} P_r \tag{36}$$

θα πρέπει να υπολογίσουμε πρώτα τα στοιχεία $w_r, w_{r+1}, \ldots, w_n$ του διανύσματος $w^{(r)}$ έτσι ώστε ο πίνακας $P_r A_{r-1} P_r$ να μηδενίζει τα $n-r$ στοιχεία εκτός των τριδιαγωνίων, στη γραμμή $r-1$ και στη στήλη $r-1$ του A_{r-1}. Για την παραγωγή των τύπων υπολογισμού των $w_r, w_{r+1}, \ldots, w_n$ ας εξετάσουμε αναλυτικά την περίπτωση όπου $n=4$ και $r=2$. Με άλλα λόγια έστω ο συμμετρικός πίνακας

$$A_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}.$$

Στη συνέχεια θέλουμε να μηδενίσουμε τα συμμετρικά ζευγάρια δηλαδή

$$a_{13} = a_{31} = 0 \;\; \text{και} \;\; a_{14} = a_{41} = 0 \tag{37}$$

όπου

$$P_2 = I - 2w^{(2)}w^{(2)^T} \tag{39}$$

και

$$w^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{bmatrix} \tag{40}$$

με

$$w_2^2 + w_3^2 + w_4^2 = 1. \tag{41}$$

Σχηματίζοντας τον P_2 έχουμε ότι

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-2w_2^2 & -2w_2w_3 & -2w_2w_4 \\ 0 & -2w_3w_2 & 1-2w_3^2 & -2w_3w_4 \\ 0 & -2w_4w_2 & -2w_4w_3 & 1-2w_4^2 \end{bmatrix}.$$

Επειδή ο A_2 είναι συμμετρικός δείχνουμε μόνο την 1η στήλη. Έτσι

$$A_2 = P_2A_1P_2$$

$$= P_2 \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-2w_2^2 & -2w_2w_3 & -2w_2w_4 \\ 0 & -2w_3w_2 & 1-2w_3^2 & -2w_3w_4 \\ 0 & -2w_4w_2 & -2w_4w_3 & 1-2w_4^2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-2w_2^2 & -2w_2w_3 & -2w_2w_4 \\ 0 & -2w_3w_2 & 1-2w_3^2 & -2w_3w_4 \\ 0 & -2w_4w_2 & -2w_4w_3 & 1-2w_4^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a'_{12} & a'_{13} & a'_{14} \\ a_{21} & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} \\ a_{31} & a'_{32} & a'_{33} & a'_{34} \\ a_{41} & a'_{42} & a'_{43} & a'_{44} \end{bmatrix} \tag{42}$$

$$
= \begin{bmatrix} a''_{11} & a''_{12} & a''_{13} & a''_{14} \\ a_{21}(1-2w_2^2)+a_{31}(-2w_2w_3)+a_{41}(-2w_2w_4) & a''_{22} & a''_{23} & a''_{24} \\ a_{21}(-2w_3w_2)+a_{31}(1-2w_3^2)+a_{41}(-2w_3w_4) & a''_{32} & a''_{33} & a''_{34} \\ a_{21}(-2w_4w_2)+a_{31}(-2w_4w_3)+a_{41}(1-2w_4^2) & a''_{42} & a''_{43} & a''_{44} \end{bmatrix}.
$$

Για την απλοποίηση των υπολογισμών χρησιμοποιούμε τους τόνους προκειμένου να διαφοροποιήσουμε τα στοιχεία του A_2 από τα αντίστοιχα του A_1. Αν τώρα θέσουμε

$$p = w_2 a_{21} + w_3 a_{31} + w_4 a_{41} \tag{43}$$

τότε τα στοιχεία της πρώτης στήλης του A_2 γράφονται στην απλούστερη μορφή

$$\begin{aligned} a''_{11} &= a_{11} \\ a''_{21} &= a_{21} - 2w_2 p \\ a''_{31} &= a_{31} - 2w_3 p \\ a''_{41} &= a_{41} - 2w_4 p. \end{aligned} \tag{44}$$

Έστω τώρα s_k^2 συμβολίζει το άθροισμα των τετραγώνων των στοιχείων κάτω από την κύρια διαγώνιο στην k στήλη. Τότε για τον A_2 έχουμε στην πρώτη στήλη

$$\begin{aligned} s_1^2 &= (a''_{21})^2 + (a''_{31})^2 + (a''_{41})^2 \\ &= (a_{21} - 2w_2p)^2 + (a_{31} - 2w_3p)^2 + (a_{41} - 2w_4p)^2 \qquad (45) \\ &= a_{21}^2 + a_{31}^2 + a_{41}^2 - 4p(a_{21}w_2 + a_{31}w_3 + a_{41}w_4) + 4p^2(w_2^2 + w_3^2 + w_4^2) \end{aligned}$$

ή

$$\begin{aligned} s_1^2 &= a_{21}^2 + a_{31}^2 + a_{41}^2 - 4p^2 + 4p^2 \\ &= a_{21}^2 + a_{31}^2 + a_{41}^2. \end{aligned}$$

Συνεπώς η ποσότης s_1^2 είναι η ίδια για τους A_3και A_2 δηλαδή παραμένει αναλλοίωτη κάτω από το μετασχηματισμό του Householder.

Θεώρημα 2.

Το άθροισμα των τετραγώνων των στοιχείων κάτω από την κύρια διαγώνιο της στήλης $r-1$ του πίνακα A_{r-1} παραμένει αναλλοίωτο κάτω από το μετασχηματισμό του Householder $A_r = P_r A_{r-1} P_r$.
Το ίδιο συμβαίνει, λόγω συμμετρίας, και για τα στοιχεία δεξιά της κύριας διαγωνίου στη γραμμή $r-1$.

Ας θέσουμε τώρα

$$a''_{31} = a''_{41} = 0$$

τότε

$$\begin{aligned} a_{21} - 2w_2 p &= \pm s_1 (s_1^2 = (a''_{21})^2) \\ a_{31} - 2w_3 p &= 0 \\ a_{41} - 2w_4 p &= 0 \end{aligned} \tag{46}$$

όπου

$$s_1 = \sqrt{a_{21}^2 + a_{31}^2 + a_{41}^2}. \tag{47}$$

Πολλαπλασιάζοντας τις ανωτέρω εξισώσεις με w_2, w_3 και w_4, αντίστοιχα και προσθέτοντας έχουμε

$$w_2 a_{21} + w_3 a_{31} + w_4 a_{41} - 2p(w_2^2 + w_3^2 + w_4^2) = \pm w_2 s_1$$

ή

$$p - 2p = \pm w_2 s_1$$

ή

$$p = \pm w_2 s_1. \tag{48}$$

Έτσι λοιπόν αντικαθιστώντας την τιμή του p στις εξισώσεις (46) λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} a_{21} \pm 2w_2^2 s_1 &= \pm s_1 \\ a_{31} \pm 2w_2 w_3 s_1 &= 0 \\ a_{41} \pm 2w_2 w_4 s_1 &= 0. \end{aligned} \tag{49}$$

Οπότε λύνοντας τις τρεις μη-γραμμικές εξισώσεις με τρεις αγνώστους w_2, w_3 και w_4 προκύπτουν

$$\begin{aligned} w_2^2 &= \frac{s_1 \pm \alpha_{21}}{2s_1} \\ w_3 &= \pm \frac{a_{31}}{2w_2 s_1} \\ w_4 &= \pm \frac{a_{41}}{2w_2 s_1}. \end{aligned} \tag{50}$$

Στις παραπάνω σχέσεις πρέπει να αποφασίσουμε για τη χρήση του πρόσημου. Προκειμένου να αποφύγουμε το μηδενισμό του αριθμητή στην πρώτη εξίσωση διαλέγουμε το πρόσημο να συμφωνεί με το $signa_{21}$. Έτσι

$$\begin{aligned} w_2^2 &= \frac{a_{21}\left(signa_{21}\right) + s_1}{2s_1} \\ w_3 &= a_{31}\left(\frac{signa_{21}}{2w_2 s_1}\right) \\ w_4 &= a_{41}\left(\frac{signa_{21}}{2w_2 s_1}\right). \end{aligned} \tag{51}$$

Στη συνέχεια δεν χρησιμοποιούμε την τετραγωνική ρίζα για τον υπολογισμό του w_2 επειδή όλες οι παραπάνω σχέσεις είναι δευτέρου βαθμού ως προς w_2. Έτσι διαιρώντας την πρώτη εξίσωση με w_2 έχουμε

$$w_2 = \frac{a_{21}(signa_{21}) + s_1}{2w_2 s_1}$$

τότε το $w^{(2)}$ έχει την εξής απλή μορφή

$$w^{(2)} = \left(\frac{signa_{21}}{2w_2 s_1}\right)\begin{bmatrix} 0 \\ a_{21} + s_1(signa_{21}) \\ a_{31} \\ a_{41} \end{bmatrix} \tag{52}$$

ή

$$w^{(2)} = \beta_2 \upsilon^{(2)} \tag{53}$$

όπου

$$\beta_2 = \frac{sign a_{21}}{2w_2 s_1} \qquad \text{και} \qquad \upsilon^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 \\ a_{21} + s_1 (sign a_{21}) \\ a_{31} \\ a_{41} \end{bmatrix}. \tag{54}$$

Εκφράζοντας τον P_2 συναρτήσει του $\upsilon^{(2)}$ αντί του $w^{(2)}$ έχουμε .

$$\begin{aligned} P_2 &= I - 2w^{(2)} {w^{(2)}}^T \\ &= I - 2\beta_2^2 \upsilon^{(2)} {\upsilon^{(2)}}^T \\ &= I - \alpha_2 \upsilon^{(2)} {\upsilon^{(2)}}^T, \end{aligned} \tag{55}$$

όπου

$$\alpha_2 = 2\beta_2^2 = 2\frac{1}{4w_2^2 s_1^2} = \frac{1}{s_1^2 + s_1 |a_{21}|} \tag{56}$$

λόγω της (54) και της πρώτης σχέσης των (51). Χρησιμοποιώντας τα $\upsilon^{(2)}$ αντί των $w^{(2)}$ αποφεύγουμε τον υπολογισμό μιας τετραγωνικής ρίζας κατά τους υπολογισμούς μας. Έτσι λοιπόν έχουμε το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 3.

Ο μετασχηματισμός $P_r A_{r-1} P_r$ όπου $P_r = I - \alpha_r \upsilon^{(r)} \upsilon^{(r)^T}$

$$\alpha_r = \frac{1}{s_{r-1}^2 + s_{r-1}|a_{r,r-1}|} \tag{57}$$

$$\upsilon^{(r)} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \hat{a}_{r,r-1} \\ a_{r+1,r-1} \\ \vdots \\ a_{n,r-1} \end{bmatrix} \tag{58}$$

με $\hat{a}_{r,r-1} = a_{r,r-1} + s_{r-1}(sign a_{r,r-1})$ και $s_{r-1} = \sqrt{a_{r,r-1}^2 + a_{r+1,r-1} + \cdots + a_{n,r-1}^2}$ θα μηδενίσει τα $n - r$ εκτός των τριδιαγωνίων στοιχείων στη γραμμή $r - 1$ και στήλη $r - 1$ του A_{r-1} (η απόδειξη αφήνεται σαν άσκηση).

Δεν χρειάζεται όμως να σχηματίσουμε τον P_r προκειμένου να εφαρμόσουμε τον

$$P_1 A_{r-1} P_r$$

καθόσον

$$\begin{aligned} A' &= PAP \\ &= (I - \alpha v v^T) A (I - \alpha v v^T) \\ &= A - \alpha v v^T A - \alpha A v v^T + \alpha^2 v (v^T A v) v^T \\ &= A - \alpha v v^T A - \alpha A v v^T + \alpha^2 (v^T A v) v v^T \\ &= A - \left(v q^T + q v^T \right) \end{aligned} \tag{59}$$

όπου

$$\begin{aligned} q &= u - \mu v \\ u &= 2 A v \\ \mu &= \frac{\alpha}{2} v^T u. \end{aligned} \tag{60}$$

Έτσι αν γνωρίζουμε το υ τότε υπολογίζουμε το q και μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την (59) προκειμένου να εκτελέσουμε το μετασχηματισμό. Παρατηρούμε τέλος ότι μετά το μετασχηματισμό $P_r A_{r-1} P_r$ τα μετασχηματισμένα στοιχεία στη στήλη $r-1$ (με όμοια αποτελέσματα για τη γραμμή $r-1$) είναι τα

$$\begin{aligned} a'_{r-1,r-1} &= a_{r-1,r-1} \\ a'_{r,r-1} &= s_{r-1} \qquad (61) \\ a'_{r+1,r-1} &= 0 \\ &\vdots \\ a'_{n,r-1} &= 0. \qquad (62) \end{aligned}$$

Η δεύτερη εξίσωση της (61) είναι άμεση συνέπεια του Θεωρήματος 3 και μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν ένας έλεγχος για την ακρίβεια των υπολογισμών. Τέλος, το πλήθος των πολλαπλασιασμών για την τριδιαγωνοποίηση είναι το μισό της μεθόδου του Givens.

Υπολογισμός του Ιδιοσυστήματος ενός Συμμετρικού Τριδιαγώνιου πίνακα

Οι μέθοδοι του Givens και του Householder μετασχηματίζουν ένα συμμετρικό πίνακα σε ένα συμμετρικό τριδιαγώνιο πίνακα. Απομένει λοιπόν ο προσδιορισμός του ιδιοσυστήματος αυτού του πίνακα. Στο σημείο αυτό θα πρέπει να αποφασίσουμε αν χρειαζόμαστε το πλήρες ιδιοσύστημα (δηλαδή όλες τις ιδιοτιμές με ή χωρίς τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα) ή απλά μερικές ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματά τους. Στη συνέχεια θα ασχοληθούμε με το τελευταίο πρόβλημα, ενώ για το πρώτο πρόβλημα υπάρχει μία περισσότερο αποτελεσματική μέθοδος.

Έστω ο συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας

$$T = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \mathbf{0} & & b_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & b_{n-1} & a_n \end{bmatrix}. \tag{63}$$

Υποθέτουμε ότι $b_i \neq 0, \; i = 1, 2, \ldots, n-1$.

Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε την τιμή του χαρακτηριστικού πολυωνύμου του T χωρίς τον υπολογισμό των συντελεστών του.
Αν $P_i(\lambda)$ είναι η ορίζουσα του οδηγού κύριου υποπίνακα, τάξης i του $T - \lambda I$, τότε για $i = 1, 2, 3$ λαμβάνουμε

$$\begin{aligned} P_1(\lambda) &= a_1 - \lambda \\ P_2(\lambda) &= (a_2 - \lambda)P_1(\lambda) - b_1^2 \\ P_3(\lambda) &= (a_3 - \lambda)P_2(\lambda) - b_2^2 P_1(\lambda) \end{aligned} \tag{64}$$

πράγμα που δηλώνει μία γενική αναδρομική σχέση η οποία δίνεται από το ακόλουθο θεώρημα.

Θεώρημα 1

Αν T είναι ένας πραγματικός συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας και αν $T - \lambda I$ δίνεται από την

$$T - \lambda I = \begin{bmatrix} a_1 - \lambda & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 - \lambda & b_2 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \mathbf{0} & & b_{n-2} & a_{n-1} - \lambda & b_{n-1} \\ & & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{bmatrix} \tag{65}$$

τότε για $i = 1, 2, \ldots, n$

$$P_i(\lambda) = (a_i - \lambda)P_{i-1}(\lambda) - b_{i-1}^2 P_{i-2}(\lambda) \tag{66}$$

όπου $P_{-1}(\lambda) \equiv 0, \quad P_0(\lambda) \equiv 1$ και $b_0 = 0$.

Απόδειξη

Αν

$$P_i(\lambda) = det \begin{bmatrix} a_1-\lambda & b_1 & & & & \\ b_1 & a_2-\lambda & b_2 & & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ 0 & & b_{i-2} & a_{i-1}-\lambda & b_{i-1} \\ & & & b_{i-1} & a_i-\lambda \end{bmatrix} \quad (67)$$

τότε αναπτύσσοντας την ορίζουσα ως προς τα στοιχεία της τελευταίας γραμμής έχουμε για $i \geq 3$ την (66).

□

Είναι φανερό τώρα ότι οι ρίζες κάθε πολυωνυμικής εξίσωσης $P_i(\lambda) = 0$ είναι πραγματικές. Επειδή $P_n(\lambda) = det(T - \lambda I)$είναι το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του T, ο σκοπός μας είναι να βρούμε τις ρίζες της $P_n(\lambda) = 0$.

Θεώρημα 2

Αν T είναι ο πραγματικός συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας που ορίζεται από την (63) με $b_i \neq 0, \ \ i = 1, 2, \ldots, n-1$, τότε οι ρίζες κάθε εξίσωσης $P_i(\lambda) = 0$ είναι διακεκριμένες και χωρίζονται από τις ρίζες της $P_{i-1}(\lambda) = 0$.

Απόδειξη

Επειδή $b_k \neq 0$ για $k = 1, 2, \ldots, n-1$, καμία από τις δύο διαδοχικές εξισώσεις $P_{i-1}(\lambda) = 0$ και $P_i(\lambda) = 0$ δεν είναι δυνατόν να έχουν μία κοινή ρίζα, γιατί αν είχαν, τότε, λόγω της (66) και οι $P_{i-2}(\lambda) = 0, \ P_{i-3}(\lambda) = 0, \ \ldots, \ P_i(\lambda) = 0$ θα είχαν την ίδια ρίζα.

Αλλά το a_1 είναι η μοναδική ρίζα της $P_1(\lambda) = 0$ και το a_1 δεν είναι ρίζα της $P_2(\lambda) = 0$, αφού $b_1 = 0$ λόγω της υπόθεσης. Ο διαχωρισμός των ριζών αποδεικνύεται με τη μέθοδο της επαγωγής.

Εύκολα μπορεί να διαπιστωθεί ότι το a_1, η ρίζα της $P_1(\lambda) = 0$, βρίσκεται μεταξύ των διακεκριμένων ριζών της $P_2(\lambda) = 0$. Υποθέτουμε ότι οι ρίζες των $P_{i-2}(\lambda) = 0$ και $P_{i-1}(\lambda) = 0$ είναι διακεκριμένες και οι ρίζες της πρώτης χωρίζουν τις ρίζες της δεύτερης. Έστω $r_1 < r_2 < \cdots < r_{i-1}$ οι ρίζες της $P_{i-1}(\lambda) = 0$.

...απόδειξη

Τότε από την αναδρομική σχέση (66) για $k = 1, 2, \ldots, i-1$ έχουμε

$$P_i(r_k) = -b_{i-1}^2 P_{i-2}(r_k)$$

το οποίο σημαίνει ότι οι ποσότητες $P_i(r_k)$ και $P_{i-2}(r_k)$ έχουν αντίθετα πρόσημα. Ωστόσο, λόγω της υπόθεσης της επαγωγής, το $P_{i-2}(\lambda)$ αλλάζει πρόσημο μεταξύ των r_k και r_{k+1}, $k = 1, 2, \ldots, i-2$ πράγμα που σημαίνει ότι και το $P_i(\lambda)$ αλλάζει πρόσημο.

Με άλλα λόγια η $P_i(\lambda) = 0$ έχει μια ρίζα μεταξύ κάθε ζευγαριού διαδοχικών ριζών της $P_{i-1}(\lambda) = 0$. Επειδή δε

$$P_i(\lambda) \to \begin{cases} \infty, & \lambda \to -\infty \\ (-1)^i \infty, & \lambda \to \infty \end{cases}$$

για $i = 1, 2, \ldots, n$ έπεται ότι η $P_i(\lambda) = 0$ έχει μια ρίζα δεξιά της r_{i-1} και μια ρίζα αριστερά της r_1. Αν οι ρίζες της $P_i(\lambda)$ είναι οι $s_1, s_2, \ldots, s_i$ δείξαμε ότι

$$s_1 < r_1 < s_2 < r_2, \cdots < s_{i-1} < r_{i-1} < s_i.$$

...απόδειξη

Συνεπώς οι ρίζες της $P_i(\lambda) = 0$ είναι διακεκριμένες και χωρίζονται από τις ρίζες της $P_{i-1}(\lambda) = 0$. $\square$

Η ιδιότητα αυτή αποτελεί τη βάση μιας αποτελεσματικής τεχνικής για τον προσδιορισμό των θέσεων των ιδιοτήτων του T. Πιο συγκεκριμένα η ακολουθία των πολυωνύμων $\{P_i(\lambda)\},\ i = 1, 2, \dots, n$ που ορίζεται από την (66) αποτελεί μια ακολουθία Sturm στο διάστημα $(-\infty,\ \infty)$ σύμφωνα με τον ακόλουθο ορισμό.

Ορισμός

Ας θεωρήσουμε την ακολουθία των πραγματικών πολυωνύμων $p_0(x), p_1(x), p_2(x), \ldots, p_n(x)$ με τις παρακάτω δύο ιδιότητες, όσον αφορά ένα ανοικτό διάστημα (a, b), όπου a μπορεί να είναι το $-\infty$ και b το ∞:

(i) Για κάθε τιμή $x_0 \in (a, b)$, αν $p_k(x_0) = 0$, τότε

$$P_{k-1}(x_0)P_{k+1}(x_0) < 0$$

το οποίο σημαίνει ότι τα $P_{k-1}(x_0)$ και $P_{k+1}(x_0)$ έχουν αντίθετα πρόσημα.

(ii) $p_0(x) \neq 0$ για κάθε $x \in (a, b)$.

Τότε η ακολουθία αυτή των πολυωνύμων καλείται μια ακολουθία Sturm στο διάστημα (a, b).

Ορισμός

Στο σχήμα 1 παρουσιάζεται ο διαχωρισμός των ριζών για $n = 3$, όπου a_1 είναι ρίζα της $P_1(\lambda) = 0$, μ_1 και μ_2 οι ρίζες της $P_2(\lambda) = 0$ και λ_1, λ_2 και λ_3 οι ρίζες της $P_3(\lambda) = 0$. Δεν έχει σημασία αν $\lambda_2 < a_1$ ή $a_1 < \lambda_2$ αρκεί $a_1, \lambda_2 \in (\mu_1, \mu_2)$.

Σχήμα 1

σξ1.πδφ

Σχήμα: Διαχωρισμός ριζών των $P_1(\lambda)$, $P_2(\lambda)$ και $P_3(\lambda)$

Ορισμός

Έστω $s(\lambda)$ ο αριθμός των αμετάβλητων προσήμων στην ακολουθία $1, P_1(\lambda), P_2(\lambda), \ldots, P_n(\lambda)$.
Αν $P_i(\lambda) = 0$ για κάποιο i λαμβάνουμε σαν πρόσημο το πρόσημο του $P_{i-1}(\lambda)$.
Για παράδειγμα, για το σχήμα 1 παρατηρούμε ότι έχουμε τον παρακάτω πίνακα όταν το λ βρίσκεται στα αντίστοιχα διαστήματα.

Πίνακας 5

	$(-\infty, \lambda_1)$	(λ_1, μ_1)	(μ_1, λ_2)	(λ_2, a_1)	(a_1, μ_2)	(μ_2, λ_3)	(λ_3, ∞)
1	+	+	+	+	+	+	+
$P_1(\lambda)$	+	+	+	+	-	-	-
$P_2(\lambda)$	+	+	-	-	-	+	+
$P_3(\lambda)$	+	-	-	+	+	+	-
s_λ	3	2	2	1	1	1	0

Από το σχήμα 1 παρατηρούμε ότι ο αριθμός $s(\lambda)$ είναι ίσος με το πλήθος εκείνων των ριζών της $P_3(\lambda) = 0$, οι οποίες είναι μεγαλύτερες ή ίσες με λ. Γενικά έχουμε

Θεώρημα 2

Η ποσότητα $s(\lambda)$ είναι το πλήθος των ριζών της $P_n(\lambda) = 0$ οι οποίες είναι μεγαλύτερες ή ίσες με λ.

Είναι φανερό λοιπόν ότι μία συστηματική αναζήτηση, χρησιμοποιώντας το Θεώρημα 2 για διάφορες τιμές του λ, θα προσδιορίσει προσεγγιστικά διαστήματα τα οποία περικλείουν μία ιδιοτιμή.

Επειδή $\rho(T) \leq \| T \|_\beta$ για κάθε norm πίνακα έχουμε ότι όλες οι ιδιοτιμές του T (ρίζες της $P_n(\lambda)$) βρίσκονται στο κλειστό διάστημα $[- \| T \|_\infty, \| T \|_\infty]$.

Χρησιμοποιώντας τώρα τη μέθοδο της διχοτόμησης και το Θεώρημα 2 μπορούμε να βρούμε ένα διάστημα το οποίο να περιέχει μόνον την ιδιοτιμή που αναζητούμε.

Στο σημείο αυτό η μέθοδος της διχοτόμησης μπορεί να συνεχιστεί μέχρις ότου επιτευχθεί η επιθυμητή ακρίβεια για την ιδιοτιμή που έχουμε απομονώσει. Φυσικά μετά από m διχοτομήσεις το μέγεθος του διαστήματος θα είναι $2^{-m}[- \| T \|_\infty, \| T \|_\infty]$.

Παράδειγμα

Δίνεται ο πίνακας

$$T = \begin{bmatrix} -2 & 1 & & \text{\Large 0} \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 \\ \text{\Large 0} & & 1 & -2 \end{bmatrix}.$$

Πόσες από τις ιδιοτιμές του βρίσκονται στο διάστημα $[-2, 0]$;

Λύση

Αν λ = 0 τότε από το Θεώρημα 2 βρίσκουμε

$$P_0(0) = 1, \quad P_1(0) = -2, \quad P_2(0) = 3, \quad P_3(0) = -4, \quad \text{και} \quad P_4(0) = 5.$$

Η ακολουθία των σημείων της $\{P_i(0)\}, \quad i = 0, 1, \ldots, 4$ είναι

$$+ - + - +$$

οπότε $s(0) = 0$ πράγμα που δηλώνει ότι ο T δεν έχει καμία θετική ή μηδέν ιδιοτιμή, δηλαδή ο T είναι ένας αρνητικά ορισμένος πίνακας.

Αν $\lambda = -2$ τότε έχουμε την ακολουθία $P_0(-2) = 1,\ P_1(-2) = 0,$ $P_2(-2) = -1,\ P_3(-2) = 0,\ P_4(-2) = 1$ και η ακολουθία των προσήμων είναι η $+ + - - +$, άρα $s(-\lambda) = 2$ πράγμα που σημαίνει ότι ο T έχει δύο ιδιοτιμές του στο διάστημα $[-2, 0]$.

Στη συνέχεια μπορούμε να διχοτομήσουμε το διάστημα $[-2, 0]$ και να επαναλάβουμε την παραπάνω διαδικασία μέχρις ότου βρούμε κάποιο διάστημα που περιέχει μόνο την ιδιοτιμή που επιθυμούμε.

Η παραπάνω τεχνική είναι πολύ αποτελεσματική αν χρειάζεται να βρούμε τις ιδιοτιμές σε ένα συγκεκριμένο διάστημα ή μερικές από τις πρώτες ή μερικές από τις τελευταίες ιδιοτιμές ενός $n \times n$ συμμετρικού τριδιαγώνιου πίνακα.

Υποθέτουμε τώρα ότι έχουμε υπολογίσει μία ή περισσότερες ιδιοτιμές ενός συμμετρικού πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ αφού πρώτα τον μετασχηματίσαμε σε ένα συμμετρικό τριδιαγώνιο πίνακα T.

Έστω

$$A = P^T TP$$

με $P^T P = I$.

Αν λ είναι μία ιδιοτιμή του T με αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα y, τότε $Ty = \lambda y$ και έτσι

$$\begin{aligned} \lambda(P^T y) &= P^T Ty \\ &= P^T TP(P^T y) \\ &= A(P^T y) \end{aligned}$$

δηλαδή το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα στη λ ιδιοτιμή του A είναι το

$$x = P^T y. \tag{68}$$

Με άλλα λόγια μπορούμε να υπολογίσουμε το ιδιοδιάνυσμα x του A υπολογίζοντας πρώτα το ιδιοδιάνυσμα y του T και μετά να χρησιμοποιήσουμε την (68). Για λόγους υπολογιστικής ευστάθειας, ο Wilkinson (σελ. 142) συνιστά τη χρήση της αντίστροφης μεθόδου των δυνάμεων για τον υπολογισμό του y.

Παρατηρήσεις

1. Αν ο τριδιαγώνιος πίνακας T παράγεται από μία ακολουθία μετασχηματισμών του Householder, τότε από την (68) έχουμε

$$
\begin{aligned}
x &= (P_2 P_3 \dots P_{n-1}) y \\
&= [I - a_2 \upsilon^{(2)} \upsilon^{(2)^T}] \dots [I - a_{n-1} \upsilon^{(n-1)} \upsilon^{(n-1)^T}] y
\end{aligned}
$$

   και οι πολλαπλασιασμοί αυτοί μπορούν να γίνουν πολύ απλά αν παρατηρήσουμε ότι

$$(I - a\upsilon\upsilon^T) y = y - a(\upsilon^T y)\upsilon.$$

   Η απλότητα των υπολογισμών ενισχύεται από το γεγονός ότι, για το $\upsilon^{(r)}$, τα πρώτα $r-1$ στοιχεία είναι μηδέν.

2. Η μέθοδος του Householder βρίσκει μία ιδιοτιμή κάθε φορά και αν, όπως συχνά είναι η περίπτωση, επιθυμούμε μόνο μία ιδιοτιμή, τότε ο αλγόριθμος αυτός είναι κατάλληλος. Ακόμα και αν επιθυμούμε όλες τις ιδιοτιμές απαιτεί λιγότερο υπολογιστικό χρόνο από τις παραλλαγές της μεθόδου Jacobi και για το λόγο αυτό χρησιμοποιείται πάρα πολύ συχνά για πραγματικούς, συμμετρικούς πίνακες. Η μέθοδος του Jacobi από την άλλη πλευρά είναι κατάλληλη για την εύρεση όλων των ιδιοτιμών ταυτόχρονα μαζί με το πλήρες ορθοκανονικό σύνολο των ιδοδιανυσμάτων (αν η τάξη του πίνακα n δεν είναι τόσο μεγάλη ώστε ο υπολογιστικός χρόνος να είναι λίγος).