



ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ  
ΑΘΗΝΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

Διπλωματική Εργασία

Γενικευμένο Πρόβλημα  
Ιδιοτιμών

Μπικοπούλου Σοφία

ΑΘΗΝΑ

ΙΟΥΝΙΟΣ 2015



ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ  
ΑΘΗΝΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

Διπλωματική Εργασία

# Γενικευμένο Πρόβλημα Ιδιοτιμών

Μπικοπούλου Σοφία

|                        |                         |                        |
|------------------------|-------------------------|------------------------|
| Δουγαλής Βασίλειος     | Τριμελής επιτοπή:       | Δρακόπουλος Μιχάλης    |
| Καθηγητής              | Μητρούλη Μαριλένα       | Επίκουρος Καθηγητής    |
| Εθνικού Καποδιστριακού | Αναπληρώτρια Καθηγήτρια | Εθνικού Καποδιστριακού |
| Πανεπιστημίου Αθηνών   | Εθνικού Καποδιστριακού  | Πανεπιστημίου Αθηνών   |
|                        | Πανεπιστημίου Αθηνών    |                        |
|                        | (επιβλέπουσα)           |                        |

ΑΘΗΝΑ

ΙΟΥΝΙΟΣ 2015



# Περίληψη

Το πρόβλημα εύρεσης ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων συναντάται σε πολλές πρακτικές εφαρμογές των επιστημών. Ειδικότερα, προβλήματα της φυσικής και της μηχανικής απαρτίζονται από συστήματα διαφορικών εξισώσεων, των οποίων η λύση εκφράζεται με τη βοήθεια ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων. Το συμμετρικό γενικευμένο πρόβλημα εμφανίζεται σε πολλές επιστημονικές εφαρμογές, κυρίως της γεωλογίας, της θεωρίας ελέγχου και συστημάτων, της ανάλυσης δονήσεων μηχανικών δομών αλλά και της επεξεργασίας εικόνας. Η παρούσα διπλωματική εργασία σχετίζεται με τη διερεύνηση του κανονικού και του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών και χωρίζεται σε τρεις κύριες θεματικές ενότητες.

Το πρώτο μέρος παρουσιάζει τις ευρέως γνωστές αριθμητικές μεθόδους, των οποίων η χρησική αξία είναι εμφανής σε μαθηματικά προβλήματα. Αποτελεσματικές, ακριβείς μέθοδοι υπολογισμού ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων τυχαίων πινάκων δεν ήταν γνωστές, μέχρι την ανακάλυψη της QR παραγοντοποίησης. Υπάρχουν πολλοί τρόποι υπολογισμού της QR παραγοντοποίησης, όπως οι μετασχηματισμοί Gram-Schmidt, Householder και Givens. Ο κάθε μετασχηματισμός έχει μειονεκτήματα και πλεονεκτήματα. Για συγκεκριμένες περιπτώσεις απαιτούνται αποτελεσματικοί εξειδικευμένοι αλγόριθμοι. Για παράδειγμα, στην περίπτωση των μεγάλων αραιών πινάκων, ο αλγόριθμος Lanczos είναι μία αποτελεσματική επαναληπτική μέθοδος υπολογισμού ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων ενός πίνακα.

Το δεύτερο μέρος αποτελείται από μία πλήρη ανάλυση αριθμητικών μεθόδων, στο-

χεύοντας την επίλυση του κανονικού προβλήματος ιδιοτιμών. Ανάμεσα στους αλγόριθμους που περιγράφονται στην ενότητα αυτή, η Power Method και η Inverse Iteration είναι οι πιο διαδεδομένες μέθοδοι αν η μεγαλύτερη ιδιοτιμή και το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα είναι προς υπολογισμό, και η Implicit QR Iteration, αν απαιτούνται όλες οι ιδιοτιμές. Η χρησιμότητα της QR παραγοντοποίησης είναι πασιφανής στο συγκεκριμένο σημείο.

Στο τρίτο μέρος, το κεντρικό μέρος της εργασίας αυτής, παρουσιάζεται το γενικευμένο και το συμμετρικό γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών. Οι αλγόριθμοι που χρησιμοποιήθηκαν νωρίτερα λειτουργούν με βάση τα πλεονεκτήματα των νέων δεδομένων. Ο αλγόριθμος QZ και οι μέθοδοι Arnoldi και Lanczos ξεχωρίζουν εξαιτίας της υπολογιστικής αποτελεσματικότητάς τους. Πιο σύγχρονοι αλγόριθμοι, όπως ο MDR και οι διαφορετικές περιπτώσεις του, υπόσχονται υπολογιστική υλοποιησιμότητα με ταχύτερη σύγκλιση.

# Abstract

The problem of finding the eigenvalues and eigenvectors appears in many practical applications of science. Especially, problems in physics and engineering are typically modeled by systems of differential equations. Their solution, in turn, is often expressed by means of eigenvalues and eigenvectors. The symmetric generalized problem arises in various scientific fields, such as geology, control theory, vibration analysis and image processing. The current thesis is related to the standard and generalized eigenvalue problem and it is divided into three main parts.

The first part presents celebrated numerical methods, whose usefulness is obvious in many mathematical issues. Efficient and accurate methods for calculating eigenvalues and eigenvectors of random matrices were unknown until the contrivance of the QR decomposition. There are several methods for actually computing the QR decomposition, such as by means of the Gram-Schmidt process, Householder transformations, or Givens rotations. Each has a number of advantages and disadvantages. Special cases can be treated efficiently with specialized algorithms. For instance, in the case of large sparse matrices, the Lanczos algorithm allows one to compute eigenvalues and eigenvectors in an effective manner.

The second part consists of a thorough presentation of numerical algorithms, targeting the standard eigenvalue problem. Among the algorithms discussed in this section, the Power Method and Inverse Iteration are in the spotlight if the largest eigenvalue and the corresponding eigenvector are in need of computation, and the

Implicit QR Iteration, if all eigenvalues are required. The necessity of the QR factorization is apparent at the current point.

In the third part, the core section of the paper, the generalized and symmetric generalized eigenvalue problems are presented. The algorithms used previously take under consideration the new input data. The well known QZ algorithm and the Arnoldi and Lanczos Methods are discriminated because of their outstanding computational functionality. Newer algorithms, like MDR and its diversified situations, are also effective and convergence promising.



# Ευχαριστίες

Πρώτα απ' όλα, θα ήθελα να ευχαριστήσω την επιβλέπουσα της διπλωματικής εργασίας μου, αναπληρώτρια καθηγήτρια κ. Μαριλένα Μητρούλη, για την πολύτιμη βοήθειά της. Την ευχαριστώ για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με ένα τόσο ενδιαφέρον αντικείμενο που ανταποκρίνεται απολύτως στα επιστημονικά μου ενδιαφέροντα καθώς και για την αμέριστη συμπαράστασή της καθ' όλη την διάρκεια της εκπόνησης.

Επιπλέον, είμαι ευγνώμων στα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της διπλωματικής εργασίας, καθηγητή κ. Βασίλειο Δουγαλή και επίκουρο καθηγητή κ. Μιχάλη Δρακόπουλο για την προσεκτική ανάγνωση της εργασίας μου και για τις πολύτιμες υποδείξεις τους. Οφείλω ευχαριστίες στον καθηγητή κ. Biswa Nath Datta του Department of Mathematical Sciences του Northern Illinois University των Η.Π.Α., που με καθοδήγησε στο πολύ ενδιαφέρον και ευρύ αντικείμενο της αριθμητικής γραμμικής άλγεβρας και μου προσέφερε χωρίς ενδοιασμούς τις γνώσεις του και τις συμβουλές του.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά όλους τους φίλους μου που πίστεψαν σε μένα και με ενθάρρυναν σε κάθε στάδιο των σπουδών μου, καθώς και τους συναδέλφους συμφοιτητές που συνέβαλαν με τα σχόλια, την κριτική και τις γνώσεις τους στην αντιμετώπιση των δυσκολιών. Ιδιαίτερες ευχαριστίες θέλω να εκφράσω προς την οικογένειά μου και κυρίως τους γονείς μου για την διαχρονική συμπαράστασή τους και την ηθική στήριξη των επιλογών μου.

Την παρούσα εργασία την αφιερώνω στα ξαδέλφια μου, Μαίρη, Μίλτο και Δημήτρη.



# Περιεχόμενα

|          |                                                       |          |
|----------|-------------------------------------------------------|----------|
| <b>1</b> | <b>Βασικές έννοιες</b>                                | <b>1</b> |
| 1.1      | Ιδιοτιμή και ιδιοδιάνυσμα . . . . .                   | 1        |
| 1.2      | Ορίζουσα . . . . .                                    | 1        |
| 1.3      | Κύριοι υπόχωροι . . . . .                             | 2        |
| 1.4      | Τάξη πίνακα . . . . .                                 | 3        |
| 1.5      | Αντίστροφος πίνακα . . . . .                          | 3        |
| 1.6      | Όμοιοι πίνακες . . . . .                              | 4        |
| 1.7      | Ειδικοί πίνακες . . . . .                             | 4        |
| 1.7α'    | Διαγώνιος και άνω τριγωνικός πίνακας . . . . .        | 4        |
| 1.7β'    | Ορθοκανονικός και ορθογώνιος πίνακας . . . . .        | 5        |
| 1.7γ'    | Ερμιτιανός και συμμετρικός πίνακας . . . . .          | 5        |
| 1.7δ'    | Πίνακας Hessenberg . . . . .                          | 6        |
| 1.8      | Νόρμα διανύσματος και νόρμα πίνακα . . . . .          | 6        |
| 1.8α'    | Νόρμα διανύσματος . . . . .                           | 6        |
| 1.8β'    | Νόρμα πίνακα . . . . .                                | 7        |
| 1.9      | Χρήσιμα θεωρήματα . . . . .                           | 8        |
| 1.10     | Flop . . . . .                                        | 8        |
| <b>2</b> | <b>QR παραγοντοποίηση</b>                             | <b>9</b> |
| 2.1      | Μετασχηματισμός Householder . . . . .                 | 9        |
| 2.1α'    | Ορισμοί και ιδιότητες . . . . .                       | 9        |
| 2.1β'    | Δημιουργία μηδενικών σε διάνυσμα . . . . .            | 10       |
| 2.1γ'    | Μέθοδος Householder για QR παραγοντοποίηση . . . . .  | 11       |
| 2.2      | Μετασχηματισμός Givens . . . . .                      | 14       |
| 2.2α'    | Ορισμοί και ιδιότητες . . . . .                       | 14       |
| 2.2β'    | Δημιουργία μηδενικών σε διάνυσμα . . . . .            | 15       |
| 2.2γ'    | Δημιουργία μηδενικών σε πίνακα . . . . .              | 16       |
| 2.2δ'    | Μέθοδος Givens για QR παραγοντοποίηση . . . . .       | 16       |
| 2.3      | Μετασχηματισμός Gram-Schmidt . . . . .                | 18       |
| 2.3α'    | Μέθοδος Gram-Schmidt για QR παραγοντοποίηση . . . . . | 18       |
| 2.4      | Μετασχηματισμοί Arnoldi και Lanczos . . . . .         | 20       |
| 2.4α'    | Ορισμοί . . . . .                                     | 20       |

|          |                                                                      |           |
|----------|----------------------------------------------------------------------|-----------|
| 2.4β'    | Μέθοδος Arnoldi . . . . .                                            | 21        |
| 2.4γ'    | Συμμετρικός αλγόριθμος Lanczos . . . . .                             | 23        |
| <b>3</b> | <b>Κανονικό πρόβλημα ιδιοτιμών . . . . .</b>                         | <b>25</b> |
| 3.1      | Το πρόβλημα . . . . .                                                | 25        |
| 3.2      | Εντοπισμός των ιδιοτιμών . . . . .                                   | 26        |
| 3.2α'    | Τα θεωρήματα του Gersgorin . . . . .                                 | 26        |
| 3.2β'    | Φράγματα και νόρμες πινάκων . . . . .                                | 26        |
| 3.3      | Υπολογισμός συγκεκριμένων ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων . . . . .    | 26        |
| 3.3α'    | Power Method . . . . .                                               | 27        |
| 3.3β'    | Inverse Power Method/Inverse Iteration . . . . .                     | 28        |
| 3.3γ'    | Rayleigh Quotient . . . . .                                          | 30        |
| 3.4      | Μετασχηματισμοί ομοιότητας . . . . .                                 | 31        |
| 3.4α'    | Διαγωνοποίηση . . . . .                                              | 31        |
| 3.4β'    | Hessenberg αναγωγή μέσω ορθογώνιων μετασχηματισμών . . . . .         | 32        |
| 3.5      | Ευσαιθησία των ιδιοτιμών . . . . .                                   | 36        |
| 3.5α'    | Το θεώρημα Bauer-Fike . . . . .                                      | 36        |
| 3.5β'    | Ευσαιθησία μεμονωμένων ιδιοτιμών . . . . .                           | 36        |
| 3.5γ'    | Ευσαιθησία ιδιοτιμών κανονικού πίνακα . . . . .                      | 37        |
| 3.6      | Ευσαιθησία των ιδιοδιανυσμάτων . . . . .                             | 37        |
| 3.7      | Κανονική μορφή Schur και QR iterations . . . . .                     | 37        |
| 3.7α'    | Βασική QR iteration . . . . .                                        | 40        |
| 3.7β'    | Hessenberg QR iteration . . . . .                                    | 41        |
| 3.7γ'    | Single-shift QR iteration . . . . .                                  | 42        |
| 3.7δ'    | Double-shift QR iteration . . . . .                                  | 42        |
| 3.7ε'    | Implicit QR iteration . . . . .                                      | 43        |
| 3.7ς'    | Εξασφάλιση της real Schur form του $A$ . . . . .                     | 47        |
| 3.8      | Υπολογισμός ιδιοδιανυσμάτων . . . . .                                | 49        |
| 3.9      | Krylov subspace methods . . . . .                                    | 50        |
| 3.9α'    | Explicit restarted Arnoldi method . . . . .                          | 50        |
| 3.9β'    | Implicit restarted Arnoldi method . . . . .                          | 52        |
| <b>4</b> | <b>Γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών . . . . .</b>                      | <b>57</b> |
| 4.1      | Το πρόβλημα . . . . .                                                | 57        |
| 4.2      | Ιδιότητες ιδιοτιμών-ιδιοδιανυσμάτων των ισοδύναμων pencils . . . . . | 58        |
| 4.3      | Γενικευμένη Schur και real Schur παραγοντοποίηση . . . . .           | 59        |
| 4.3α'    | Γενικευμένη Schur παραγοντοποίηση . . . . .                          | 59        |
| 4.3β'    | Γενικευμένη real Schur παραγοντοποίηση . . . . .                     | 59        |
| 4.4      | Ο αλγόριθμος QZ . . . . .                                            | 59        |
| 4.4α'    | Φάση I: Αναγωγή σε άνω Hessenberg και άνω τριγωνική μορφή . . . . .  | 60        |
| 4.4β'    | Φάση II: Αναγωγή σε γενικευμένη real Schur form . . . . .            | 62        |
| 4.5      | Υπολογισμός γενικευμένων ιδιοδιανυσμάτων . . . . .                   | 68        |

|          |                                                                                      |           |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 4.6      | Οι αλγόριθμοι Arnoldi και Lanczos . . . . .                                          | 69        |
| 4.7      | Οι αλγόριθμοι HMDR και FMDR . . . . .                                                | 70        |
| 4.7α'    | Εισαγωγή . . . . .                                                                   | 70        |
| 4.7β'    | Αρχική αναγωγή . . . . .                                                             | 70        |
| 4.7γ'    | Βασικός μετασχηματισμός MDR . . . . .                                                | 71        |
| 4.7δ'    | Βασικός μετασχηματισμός HMDR . . . . .                                               | 72        |
| 4.7ε'    | Βασικός μετασχηματισμός FMDR . . . . .                                               | 74        |
| <b>5</b> | <b>Συμμετρικό γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών</b>                                     | <b>77</b> |
| 5.1      | Το πρόβλημα . . . . .                                                                | 77        |
| 5.2      | Ο αλγόριθμος QZ για το συμμετρικό θετικά ορισμένο πρόβλημα ιδιοτιμών                 | 78        |
| 5.3      | Ο αλγόριθμος Cholesky για το συμμετρικό θετικά ορισμένο πρόβλημα ιδιοτιμών . . . . . | 78        |
| 5.4      | Διαγωνοποίηση του συμμετρικού θετικά ορισμένου προβλήματος ιδιοτιμών                 | 79        |
| 5.5      | Ο αλγόριθμος Lanczos για το συμμετρικό θετικά ορισμένο πρόβλημα ιδιοτιμών . . . . .  | 80        |
| 5.6      | Ο αλγόριθμος MDR . . . . .                                                           | 80        |
| 5.6α'    | Εισαγωγή . . . . .                                                                   | 80        |
| 5.6β'    | Αρχική αναγωγή . . . . .                                                             | 81        |
| 5.6γ'    | Αναγωγή MDR . . . . .                                                                | 83        |
| 5.6δ'    | Αλγόριθμος MDR . . . . .                                                             | 86        |
|          | <b>Βιβλιογραφία</b>                                                                  | <b>93</b> |



# Κεφάλαιο 1

## Βασικές έννοιες

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται οι βασικότερες έννοιες της γραμμικής άλγεβρας. Αναφορές γίνονται στα [14], [2] σελ. 107-125, [5] σελ. 7-23, [15] σελ. 443-449, αλλά και σε όλα τα βιβλία γραμμικής άλγεβρας.

### 1.1 Ιδιοτιμή και ιδιοδιάνυσμα

**Ορισμός 1.1.1.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Αν υπάρχουν  $\lambda \in \mathbb{R}$  και  $x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$  με  $x \neq 0$  τέτοια ώστε

$$Ax = \lambda x$$

τότε το  $\lambda$  είναι μια **ιδιοτιμή** του πίνακα  $A$  και το  $x$  είναι ένα **ιδιοδιάνυσμα** του  $A$  που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda$ .

**Θεώρημα 1.1.2.** (i) Οι πίνακες  $A$  και  $A^T$  έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές.

(ii) Ένας πίνακας  $A$  είναι αντιστρέψιμος αν και μόνο αν οι ιδιοτιμές του είναι μη μηδενικές.

(iii) Τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές είναι γραμμικά ανεξάρτητα.

### 1.2 Ορίζουσα

**Ορισμός 1.2.1.** Για κάθε τετραγωνικό πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , όπου  $A = (a_{ij})$  ορίζουμε την ποσότητα

$$\det(A) = (-1)^{i+1} a_{i1} \det(A_{i1}) + (-1)^{i+2} a_{i2} \det(A_{i2}) + \cdots + (-1)^{i+n} a_{in} \det(A_{in}),$$

όπου  $A_{ij}$  είναι ο υποπίνακας του  $A$ , ο οποίος λαμβάνεται αφαιρώντας την  $i$  γραμμή και την  $j$  στήλη. Η ποσότητα αυτή ονομάζεται **ορίζουσα** του πίνακα  $A$ .

**Θεώρημα 1.2.2.** Έστω οι πίνακες  $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Τότε

- (i)  $\det(A) = \det(A^T)$ .
- (ii)  $\det(\alpha A) = \alpha^n \det(A)$ , όπου  $\alpha \in \mathbb{R}$ .
- (iii)  $\det(AB) = \det(A) \cdot \det(B)$ .
- (iv) Αν δύο γραμμές ή δύο στήλες του  $A$  είναι ίδιες, τότε  $\det(A) = 0$ .
- (v) Αν εναλλάξουμε δύο σειρές ή δύο στήλες του  $A$ , τότε για τον πίνακα  $C$  που προκύπτει ισχύει ότι  $\det(C) = -\det(A)$ .

**Παρατήρηση 1.2.3.** Έστω ο block-πίνακας

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ \mathbb{O} & A_{22} \end{pmatrix},$$

όπου  $A_{11}$  και  $A_{22}$  τετραγωνικοί πίνακες. Τότε η ορίζουσά του δίνεται από τον τύπο

$$\det(A) = \det(A_{11}) \cdot \det(A_{22}).$$

### 1.3 Κύριοι υπόχωροι

**Ορισμός 1.3.1.** Για κάθε πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , ο υπόχωρος

$$\text{range}(A) = \{b \in \mathbb{R}^m \mid b = Ax, x \in \mathbb{R}^n\}$$

ονομάζεται **εικόνα** του  $A$  ή **χώρος στηλών** του  $A$  και ο υπόχωρος

$$\text{range}(A^T) = \{b \in \mathbb{R}^n \mid b = A^T x, x \in \mathbb{R}^m\}$$

ονομάζεται **χώρος γραμμών** του  $A$ . Επίσης ο υπόχωρος

$$\ker(A) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\}$$

ονομάζεται **πυρήνας** του  $A$ .

**Ορισμός 1.3.2.** Αν  $\lambda \in \mathbb{R}$  είναι μια ιδιοτιμή του πίνακα  $A$ , τότε ο διανυσματικός υπόχωρος

$$V(\lambda) = \ker(A - \lambda I_V)$$

ονομάζεται **ιδιόχωρος** του  $A$  που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda$ .

**Ορισμός 1.3.3.** Έστω  $S$  υπόχωρος του  $\mathbb{R}^m$ . Τότε ο υπόχωρος

$$S^\perp = \{y \in \mathbb{R}^m \mid y^T x = 0 \quad \forall x \in S\}$$

ονομάζεται **ορθογώνιο συμπλήρωμα** του  $S$ .

**Θεώρημα 1.3.4.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Τότε

- (i)  $\ker(A) = \text{range}(A^T)^\perp$ .
- (ii)  $\text{range}(A)^\perp = \ker(A^T)$ .



## 1.4 Τάξη πίνακα

**Ορισμός 1.4.1.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Ονομάζουμε **τάξη** του πίνακα  $A$  τη διάσταση του χώρου στηλών του, δηλαδή

$$\text{rank}(A) = \dim \{\text{range}(A)\}.$$

**Ορισμός 1.4.2.** Ένας τετραγωνικός πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ονομάζεται **full-rank** αν  $\text{rank}(A) = n$  ή  $\text{rank}(A^T) = n$ . Αλλιώς ονομάζεται **rank-deficient**.

**Θεώρημα 1.4.3.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Τότε

- (i)  $\text{rank}(A) = \text{rank}(A^T)$ .
- (ii)  $\text{rank}(A) + \dim \{\ker(A)\} = n$ .
- (iii)  $\text{rank}(AB) \geq \text{rank}(A) + \text{rank}(B) - n$ , όπου  $B \in \mathbb{R}^{n \times p}$ .
- (iv)  $\text{rank}(AB) \leq \min \{\text{rank}(A), \text{rank}(B)\}$ .
- (v)  $\text{rank}(A + B) \leq \text{rank}(A) + \text{rank}(B)$ .

## 1.5 Αντίστροφος πίνακας

**Ορισμός 1.5.1.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Τότε ο πίνακας  $B$ , για τον οποίο ισχύει ότι

$$AB = BA = I,$$

όπου  $I$  ο ταυτοτικός πίνακας, ονομάζεται **αντίστροφος** του πίνακα  $A$  και συμβολίζεται με  $A^{-1}$ . Ο αντίστροφος κάθε πίνακα είναι μοναδικός.

**Ορισμός 1.5.2.** Αν ο πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  έχει αντίστροφο, τότε ονομάζεται **αντιστρέψιμος** ή **μη ιδιάζων**. Αλλιώς ονομάζεται **ιδιάζων**.

**Θεώρημα 1.5.3.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  αντιστρέψιμος. Τότε

- (i)  $(A^{-1})^{-1} = A$ .
- (ii)  $(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T$ .
- (iii)  $(cA)^{-1} = \frac{1}{c}A^{-1}$ , όπου  $c \neq 0$ ,  $c \in \mathbb{R}$  σταθερά.
- (iv)  $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ .

**Θεώρημα 1.5.4.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  αντιστρέψιμος. Τα ακόλουθα είναι ισοδύναμα:

- (i)  $\det(A) \neq 0$ .

- (ii) Ο πίνακας  $A$  έχει γραμμικά ανεξάρτητες γραμμές και στήλες.
- (iii)  $\ker(A) = \{0\}$ .
- (iv) Οι ιδιοτιμές του  $A$  είναι μη μηδενικές.
- (v)  $\text{rank}(A) = \text{rank}(A^T) = n$ .

## 1.6 Όμοιοι πίνακες

**Ορισμός 1.6.1.** Δύο πίνακες  $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ονομάζονται **όμοιοι** αν υπάρχει αντιστρέψιμος πίνακας  $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$  τέτοιος ώστε

$$B = T^{-1}AT.$$

**Θεώρημα 1.6.2.** Όμοιοι πίνακες έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές.

## 1.7 Ειδικοί πίνακες

### 1.7α' Διαγώνιος και άνω τριγωνικός πίνακας

**Ορισμός 1.7.1.** Ένας πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  ονομάζεται **διαγώνιος** αν  $a_{ij} = 0$  για  $i \neq j$ . Πολλές φορές γράφουμε  $A = \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn})$ .

**Ορισμός 1.7.2.** Ένας πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  ονομάζεται **άνω τριγωνικός** αν  $a_{ij} = 0$  για  $i > j$ , ενώ **κάτω τριγωνικός** αν  $a_{ij} = 0$  για  $i < j$ .

**Θεώρημα 1.7.3.** (i) Το γινόμενο δύο άνω ή κάτω τριγωνικών πινάκων είναι άνω ή κάτω τριγωνικός πίνακας αντίστοιχα.

(ii) Ο αντίστροφος ενός άνω ή κάτω τριγωνικού πίνακα είναι άνω ή κάτω τριγωνικός πίνακας αντίστοιχα. Τα διαγώνια στοιχεία του αντιστρόφου είναι τα αντίστροφα των διαγωνίων στοιχείων του αρχικού πίνακα.

(iii) Οι ιδιοτιμές ενός τριγωνικού πίνακα είναι τα στοιχεία της διαγωνίου του.

(iv) Η ορίζουσα ενός τριγωνικού πίνακα είναι το γινόμενο των διαγωνίων στοιχείων του. Έτσι, ένας τριγωνικός πίνακας είναι αντιστρέψιμος αν και μόνο αν τα διαγώνια στοιχεία του είναι μη μηδενικά.

**1.7β' Ορθοκανονικός και ορθογώνιος πίνακας**

**Ορισμός 1.7.4.** Ένας πίνακας  $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$  ονομάζεται **ορθοκανονικός** αν ισχύει ότι

$$U^*U = UU^* = I,$$

όπου  $U^* = (\bar{U})^T$  και  $\bar{U}$  ο μιγαδικός συζυγής του πίνακα  $U$ .

**Ορισμός 1.7.5.** Ένας πίνακας  $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ονομάζεται **ορθογώνιος** αν ισχύει ότι

$$U^T U = U U^T = I.$$

**Θεώρημα 1.7.6.** (i) Το γινόμενο δύο ορθογωνίων πινάκων είναι ορθογώνιος πίνακας.

(ii) Αν  $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ορθογώνιος τότε  $U^{-1} = U^T$ .

**1.7γ' Ερμιτιανός και συμμετρικός πίνακας**

**Ορισμός 1.7.7.** Ένας πίνακας  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  ονομάζεται **ερμιτιανός** αν ισχύει ότι

$$A^* = A.$$

**Θεώρημα 1.7.8.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  ερμιτιανός. Τότε υπάρχει μοναδιαίος πίνακας  $U$  τέτοιος ώστε

$$U^* A U = D,$$

όπου  $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ . Τα στοιχεία  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  είναι οι ιδιοτιμές του  $A$  και είναι πραγματικοί αριθμοί. Τα ιδιοδιανύσματα του  $A$  μπορούν να επιλεγούν έτσι ώστε να είναι μοναδιαία.

**Ορισμός 1.7.9.** Ένας πίνακας  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$  ονομάζεται **συμμετρικός** αν ισχύει ότι

$$A^T = A.$$

**Θεώρημα 1.7.10.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  συμμετρικός. Τότε υπάρχει ορθογώνιος πίνακας  $O$  τέτοιος ώστε

$$O^T A O = D,$$

όπου  $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ . Τα στοιχεία  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  είναι οι ιδιοτιμές του  $A$  και οι στήλες του  $O$  είναι τα ιδιοδιανύσματα του  $A$ .

**Πόρισμα 1.7.11.** Οι ιδιοτιμές ενός συμμετρικού πίνακα είναι πραγματικές και τα ιδιοδιανύσματα μπορούν να επιλεγούν έτσι ώστε να είναι ορθογώνια.

**1.7δ' Πίνακας Hessenberg**

**Ορισμός 1.7.12.** Ένας πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ονομάζεται **άνω Hessenberg** αν ισχύει ότι  $a_{ij} = 0$  για  $i > j + 1$ .

**Ορισμός 1.7.13.** Ένας πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ονομάζεται **κάτω Hessenberg** αν ισχύει ότι  $a_{ij} = 0$  για  $j > i + 1$ .

**Ορισμός 1.7.14.** Ένας πίνακας που είναι άνω και κάτω Hessenberg ονομάζεται **τριδιαγώνιος**.

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

άνω Hessenberg      κάτω Hessenberg      τριδιαγώνιος

**1.8 Νόρμα διανύσματος και νόρμα πίνακα****1.8α' Νόρμα διανύσματος**

**Ορισμός 1.8.1.** Νόρμα διανύσματος στον  $\mathbb{R}^n$  ονομάζεται μια συνάρτηση  $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  που ικανοποιεί τα ακόλουθα:

(i)  $\|x\| > 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \text{ με } x \neq 0 \text{ και } \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0.$

(ii)  $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\| \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \text{ και } \alpha \in \mathbb{R}.$

(iii)  $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$

**Παρατήρηση 1.8.2.** Έστω  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ . Τότε κάποιες εύκολα υπολογίσιμες νόρμες είναι οι ακόλουθες:

(i)  $\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n|.$

(ii)  $\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}.$

(iii)  $\|x\|_\infty = \max_{i=1,2,\dots,n} |x_i|.$

**1.8β' Νόρμα πίνακα**

**Ορισμός 1.8.3.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . **Νόρμα πίνακα** ονομάζεται μια συνάρτηση  $\|\cdot\| : \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$  που ικανοποιεί τα ακόλουθα:

- (i)  $\|A\| > 0$  και  $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$ .
- (ii)  $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\| \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}$ .
- (iii)  $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ .
- (iv)  $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$ .

**Παρατήρηση 1.8.4.** Ορίζουμε  $p$ -νόρμα πινάκων την  $\|A\|_p = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p}$ . Κάποιες εύκολα υπολογίσιμες νόρμες είναι οι ακόλουθες:

- (i)  $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |\alpha_{ij}|$ .
- (ii)  $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |\alpha_{ij}|$ .
- (iii)  $\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$ , όπου  $\rho(A) = \max |\lambda_i|$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ .
- (iv)  $\|A\|_F = \left[ \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m |\alpha_{ij}|^2 \right]^{\frac{1}{2}}$ .

**Παρατήρηση 1.8.5.** Οι νόρμες πινάκων στο  $\mathbb{C}^{n \times n}$  είναι ισοδύναμες, δηλαδή

$$\alpha \|A\|_\mu \leq \|A\|_\mu \leq \beta \|A\|_\mu.$$

**Θεώρημα 1.8.6.** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Τότε

- (i)  $\frac{1}{\sqrt{n}} \|A\|_\infty \leq \|A\|_2 \leq \sqrt{m} \|A\|_\infty$ .
- (ii)  $\|A\|_2 \leq \|A\|_F \leq \sqrt{n} \|A\|_2$ .
- (iii)  $\frac{1}{\sqrt{m}} \|A\|_1 \leq \|A\|_2 \leq \sqrt{n} \|A\|_1$ .
- (iv)  $\|A\|_2 \leq \sqrt{\|A\|_1 \|A\|_\infty}$ .

## 1.9 Χρήσιμα θεωρήματα

**Θεώρημα 1.9.1.** Έστω  $\|E\| < 1$ . Τότε ο πίνακας  $I - E$  είναι αντιστρέψιμος και ισχύει ότι

$$\|(I - E)^{-1}\| \leq (1 - \|E\|)^{-1}.$$

**Θεώρημα 1.9.2.** Αν  $\|E\| < 1$ , τότε ισχύει ότι

$$\|(I - E)^{-1} - I\| \leq \frac{\|E\|}{1 - \|E\|}.$$

**Θεώρημα 1.9.3.** Έστω  $O$  ένας ορθόγωνιος πίνακας. Τότε

(i)  $\|O\|_2 = 1$ .

(ii)  $\|AO\|_2 = \|A\|_2$ .

(iii)  $\|AO\|_F = \|A\|_F$ .

## 1.10 Flop

**Ορισμός 1.10.1.** Μία πράξη από τις  $+$ ,  $-$ ,  $\cdot$ ,  $:$  ορίζεται ως 1 **flop**, το οποίο είναι η μονάδα μέτρησης της πολυπλοκότητας ενός αλγόριθμου.

**Παράδειγμα 1.10.2.** Η πράξη  $2x + 3y$  έχει 2 πολλαπλασιασμούς και 1 πρόσθεση άρα κοστίζει 3 flops, ενώ στον αλγόριθμο

```
for  $k = 1, 2, \dots, n$  do  
     $2x + 3y$   
end for
```

έχουμε  $3 \text{ flops} \times n$  επαναλήψεις, άρα  $3n$  flops.

## Κεφάλαιο 2

# QR παραγοντοποίηση

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται μέθοδοι για την QR παραγοντοποίηση ενός πίνακα. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω πολλών και διαφορετικών μετασχηματισμών. Ενδεικτικά αναφέρονται οι πιο διαδεδομένοι μετασχηματισμοί και οι αντίστοιχοι αλγόριθμοι: Householder στην ενότητα 2.1, Givens στην ενότητα 2.2, Gram-Schmidt στην ενότητα 2.3, Arnoldi και Lanczos στην ενότητα 2.4.

Η βιβλιογραφία που χρησιμοποιήθηκε είναι [14] σελ. 119-128, [5] σελ. 181-208, σελ. 445-448, σελ. 455, [7] σελ. 116-119, [18] σελ. 128-134, [8] σελ. 250-288, [13] σελ. 250-255. Αποδείξεις θεωρημάτων σύγκλισης βρίσκουμε στο [11] σελ. 515-519.

### 2.1 Μετασχηματισμός Householder

#### 2.1α' Ορισμοί και ιδιότητες

**Ορισμός 2.1.1.** Ένας πίνακας της μορφής

$$H = I - \frac{2uu^T}{u^T u},$$

όπου  $u$  είναι μη μηδενικό διάνυσμα του  $\mathbb{R}^n$ , ονομάζεται **πίνακας Householder**. Το διάνυσμα  $u$  που ορίζεται από τον πίνακα Householder ονομάζεται **διάνυσμα Householder**.

**Θεώρημα 2.1.2.** Έστω  $H = I - \frac{2uu^T}{u^T u}$  πίνακας Householder και  $u \in \mathbb{R}^n$ . Τότε

- (i) Ο  $H$  είναι συμμετρικός.
- (ii) Ο  $H$  είναι ορθογώνιος.
- (iii)  $H^2 = I$ .
- (iv)  $Hu = -u$ .

(v)  $Hv = v$  αν  $v^T u = 0$ .

(vi) Αν το  $u$  είναι παράλληλο στο διάνυσμα  $x - y$ , όπου  $y \neq x$  αλλά  $\|y\|_2 = \|x\|_2$ , τότε  $Hx = y$ .

**Πόρισμα 2.1.3.** Έστω  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $x \in \mathbb{R}^n$  και  $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ο πίνακας Householder. Έστω επίσης ότι  $\beta = \frac{2}{u^T u}$ . Τότε

$$(i) \quad Hx = \left( I - \frac{2uu^T}{u^T u} \right) x = x - \beta u (u^T x).$$

$$(ii) \quad HA = (I - \beta uu^T) A = A - \beta uu^T A = A - \beta uv^T, \text{ όπου } v = A^T u.$$

$$(iii) \quad AH = A(I - \beta uu^T) = A - \beta wu^T, \text{ όπου } w = Au.$$

### Πολυπλοκότητα

Γινόμενο  $Hx$ :  $3n$  flops

Γινόμενο  $HA$  ή  $AH$ :  $4mn$  flops

### 2.1β' Δημιουργία μηδενικών σε διάνυσμα

Σκοπός μας είναι να μηδενίσουμε τα στοιχεία μιας στήλης, έτσι ώστε μέσω μετασχηματισμών, το διάνυσμα που θα προκύψει να είναι πολλαπλάσιο του  $e_1$ . Μια αναπαράσταση είναι η ακόλουθη:

$$x = \begin{pmatrix} * \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix} \xrightarrow{H} Hx = \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \pm \|x\|_2 e_1.$$

Συνήθως, διαλέγουμε το πρόσημο του  $x_1$  για να αποφύγουμε καταστροφικές διαγραφές ψηφίων, δηλαδή

$$u = x + \text{sign}(x_1) \|x\|_2 e_1.$$

**Θεώρημα 2.1.4.** Έστω διάνυσμα  $x \neq 0$  και  $x \neq e_1$ . Τότε ο πίνακας Householder  $H$  που ορίζεται από το διάνυσμα  $u = x \pm \|x\|_2 e_1$  είναι τέτοιος ώστε

$$Hx = \mp \|x\|_2 e_1.$$



**Αλγόριθμος 2.1.5. Δημιουργία Μηδενικών σε Διάνυσμα χρησιμοποιώντας Πίνακα Househ lder**

ΕΙΣΟΔΟΣ

Μη μηδενικό διάνυσμα  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ .

ΕΞΟΔΟΣ

Το διάνυσμα  $u = (u_1, u_2, \dots, u_n)^T$ , που τέτοιο  στε

$$\left(I - \frac{2uu^T}{u^T u}\right)x = (*, 0, \dots, 0)^T.$$

1. Ε ρεση του  $m = \max(x_1, x_2, \dots, x_n)$ .

2. Μετατροπή του  $x$ :

```
for  $i = 1, \dots, n$  do
   $x_i \equiv \frac{x_i}{m}$ 
end for
```

3. Υπολογισμός του διαν σματος  $u$ :

```
 $u_1 = x_1 + \|x\|_2 \operatorname{sign}(x_1)$ 
for  $i = 2, \dots, n$  do
   $u_i = x_i$ 
end for
```

**Πολυπλοκ τητα**

$3n$  flops.

### 2.1γ' Μ θοδος Househ lder για QR παραγοντοπο ηση

Ο αλγόριθμος δημιουργίας μηδενικών σε διάνυσμα μπορεί να επεκταθεί  στε να προκύψει η QR παραγοντοπο ηση ενός πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , δηλαδή

$$A = QR,$$

 που ο πίνακας  $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$  να είναι ορθογ νιος και ο πίνακας  $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$  να είναι  νω τριγωνικός. Η ιδ α  ίναι να ανάγουμε τον πίνακα  $A$  σε  ναν  νω τριγωνικό πίνακα  $R$  πολλαπλασι ζοντας τον  $A$  απ  αριστερά με πίνακες Househ lder. Η διαδικασία αυτ  απαιτεί  $s = \min(m - 1, n)$  β ματα. Έστω, λοιπόν, πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  με  $m \geq n$ . Τ τε  $s = n$ . Πολλαπλασι ζουμε απ  αριστερά με πίνακες  $H_1, H_2, \dots, H_n$   τσι  στε

$$H_n H_{n-1} \cdots H_2 H_1 A = R.$$

Αναλυτικότερα, τα βήματα είναι τα εξής:

$$\text{Βήμα 1. } A \xrightarrow{H_1} H_1 A = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & * \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix} = A^{(1)}.$$

$$\text{Βήμα 2. } A^{(1)} \xrightarrow{H_2} H_2 A^{(1)} = H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & \cdots & * \\ \vdots & 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & * & * \end{pmatrix} = A^{(2)}.$$

$$\text{Βήμα n. } A^{(n-1)} \xrightarrow{H_n} H_n A^{(n-1)} = H_n H_{n-1} \cdots H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & \ddots & & * \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & * \end{pmatrix} =$$

$$A^{(n)} = R.$$

Θέτοντας  $Q = H_1 H_2 \cdots H_n$ , ο οποίος είναι ορθογώνιος γιατί οι πίνακες  $H_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  είναι ορθογώνιοι, προκύπτει

$$Q^T A = R \Rightarrow A = QR.$$

#### **Αλγόριθμος 2.1.6. Householder QR Παραγοντοποίηση**

##### ΕΙΣΟΔΟΣ

$m \times n$  πίνακας  $A$ ,  $m \geq n$ .

##### ΕΞΟΔΟΣ

Τα διανύσματα Householder  $u_1, u_2, \dots, u_n$  που σχηματίζουν τον πίνακα  $Q$  και ο άνω τριγωνικός πίνακας  $R$ . Το αποτέλεσμα είναι  $A = QR$ .

##### ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ

Ο πίνακας  $R$  αποθηκεύεται στο άνω τριγωνικό κομμάτι του πίνακα  $A$ , τα στοιχεία  $u_{k+1,k}$  έως  $u_{mk}$  του  $u_k$  στις αντίστοιχες θέσεις του πίνακα  $A$  και το  $u_{kk}$  σε ξεχωριστό μονοδιάστατο πίνακα.

**for**  $k = 1, 2, \dots, n$  **do**

1. Εύρεση του διανύσματος  $u_k = (u_{kk}, \dots, u_{mk})^T$  που ορίζει τον πίνακα  $\hat{H}_k \in \mathbb{R}^{(m-k+1) \times 1}$  έτσι ώστε

$$\hat{H}_k \begin{pmatrix} \alpha_{kk} \\ \vdots \\ \alpha_{mk} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{kk} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

2. Αποθήκευση του  $r_{kk}$  πάνω στο  $\alpha_{kk}$ , δηλαδή  $\alpha_{kk} \equiv r_{kk}$ .
3. Αποθήκευση του  $u_k$  ως εξής:

$$\alpha_{ik} \equiv u_{ik}, \quad i = k+1, \dots, m$$

$$v_k \equiv u_{kk}.$$

4. Υπολογισμός του  $\beta = \frac{2}{u_k^T u_k}$ .
5. Ενημέρωση των εισόδων του υποπίνακα του  $A$ , που θα περιέχει τις σειρές από  $k$  έως  $m$  και τις στήλες από  $k$  έως  $n$ , το οποίο δηλώνεται ως  $A(k:m, k:n)$ , και αποθήκευση των εισόδων αυτών πάνω στις εισόδους του πίνακα  $A$ :

$$\begin{aligned} A(k:m, k:n) &\equiv \left( I_{m-k+1} - 2 \frac{u_k u_k^T}{u_k^T u_k} \right) A(k:m, k:n) \\ &= A(k:m, k:n) - \beta u_k u_k^T A(k:m, k:n) \end{aligned}$$

**end for**

**Πολυπλοκότητα**

$$2n^2 \left( m - \frac{n}{3} \right) \text{ flops.}$$

### Εξασφάλιση του πίνακα $Q$

Ο αλγόριθμος δεν παράγει τον πίνακα  $Q$  απευθείας. Αν χρειάζεται να υπολογιστεί, τότε σχηματίζεται από τα αποθηκευμένα διανύσματα  $u_1, u_2, \dots, u_n$ .

## 2.2 Μετασχηματισμός Givens

### 2.2α' Ορισμοί και ιδιότητες

**Ορισμός 2.2.1.** Ένας πίνακας της μορφής

$$J(i, j, c, s) = \begin{matrix} & & & & i & j & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ i & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ j & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & c & s & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -s & c & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

όπου  $c^2 + s^2 = 1$ , ονομάζεται **πίνακας Givens** και τα  $c, s$  ονομάζονται **παράμετροι Givens**.

**Παρατηρήσεις 2.2.2.** (i) Αν επιλέξουμε  $c = \cos \vartheta$  και  $s = \sin \vartheta$ , τότε μπορούμε να γράψουμε  $J(i, j, c, s) = J(i, j, \vartheta)$  και ο πίνακας Givens λέγεται μετασχηματισμός στροφής Givens. Επίσης, αφού  $c^2 + s^2 = 1$  και  $J(i, j, \vartheta) \cdot J(i, j, \vartheta)^T = I$ , ο μετασχηματισμός στροφής  $J(i, j, \vartheta)$  είναι ορθογώνιος.

(ii) Αν  $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$  τότε, για  $c = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}$  και  $s = \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}$ , ο μετασχηματισμός Givens  $J(1, 2, \vartheta) = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$  είναι τέτοιος ώστε

$$J(1, 2, \vartheta)x = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix}.$$

(iii) Για να μη δημιουργηθεί υποχειρίση ή υπερχειρίση, με μια μικρή μετατροπή, μπορούμε να υπολογίσουμε τις παραμέτρους Givens ως εξής:

Αν  $|x_2| \geq |x_1|$  τότε, για  $t = \frac{x_1}{x_2}$ , έχουμε ότι  $s = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}$  και  $c = st$ . Αλλιώς, για  $t = \frac{x_2}{x_1}$ , έχουμε ότι  $c = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}$  και  $s = ct$ .

**Αλγόριθμος 2.2.3. Κατασκευή του Πίνακα  $JA$** **ΕΙΣΟΔΟΣ**

$m \times n$  πίνακας  $A$ ,  $m \geq n$  και οι αριθμοί  $c$  και  $s$  του πίνακα Givens  $J(i, j, c, s)$ .

**ΕΞΟΔΟΣ**

Το γινόμενο  $JA$ .

**ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ**

Πάνω στον πίνακα  $A$ .

**for**  $k = 1, 2, \dots, n$  **do**

$\alpha \equiv \alpha_{ik}$

$b \equiv \alpha_{jk}$

$\alpha_{ik} \equiv \alpha c + bs$

$\alpha_{jk} \equiv -\alpha s + bc$

**end for**

**Πολυπλοκότητα**

$6n$  flops.

**2.2β' Δημιουργία μηδενικών σε διάνυσμα**

Ο μετασχηματισμός Givens μηδενίζει συγκεκριμένες θέσεις ενός διανύσματος. Αναλυτικότερα, έστω το διάνυσμα  $x = (x_1, x_2, \dots, x_k, \dots, x_n)^T$  και θέλουμε να μηδενίσουμε το στοιχείο  $x_k$ . Κατασκευάζουμε το μετασχηματισμό  $J(i, k, \vartheta)$ , που είναι τέτοιος ώστε ο πίνακας  $J(i, k, \vartheta)x$  να έχει μηδέν στην  $k$  συντεταγμένη. Μια αναπαράσταση είναι η ακόλουθη:

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \xrightarrow{J} Jx = \begin{pmatrix} * \\ * \\ \vdots \\ 0 \\ * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix}.$$

Για να κατασκευάσουμε τον  $J(i, k, \vartheta)$ , πρώτα κατασκευάζουμε τον  $2 \times 2$  μετασχηματισμό Givens  $\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$ , που είναι τέτοιος ώστε

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ x_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix},$$

και μετά σχηματίζουμε τον πίνακα  $J(i, k, \vartheta)$  εισάγωντας το  $c$  στις θέσεις  $(i, i)$  και  $(k, k)$  και το  $s$  και  $-s$  στις θέσεις  $(i, k)$  και  $(k, i)$  αντίστοιχα, γεμίζοντας τον υπόλοιπο πίνακα

με στοιχεία του μοναδιαίου πίνακα.

## 2.2γ' Δημιουργία μηδενικών σε πίνακα

**Αλγόριθμος 2.2.4. Δημιουργία Μηδενικών σε Θέσεις Πίνακα χρησιμοποιώντας Μετασχηματισμό Givens**

ΕΙΣΟΔΟΣ

$n \times n$  πίνακας  $A$ .

ΕΞΟΔΟΣ

Ο πίνακας  $J(i, j, \vartheta)A$  με μηδέν στην  $(i, j)$  θέση.

ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ

Πάνω στον πίνακα  $A$ .

1. Εύρεση των παραμέτρων Givens  $c = \cos \vartheta$  και  $s = \sin \vartheta$ , που είναι τέτοιες ώστε

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{ii} \\ \alpha_{ji} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix}.$$

2. Σχηματισμός του  $J(i, j, \vartheta)A$  και αποθήκευση πάνω στον  $A$ .

## 2.2δ' Μέθοδος Givens για QR παραγοντοποίηση

Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Τότε ο αλγόριθμος χρειάζεται  $s = \min(m - 1, n)$  βήματα για να υλοποιηθεί.

**Βήμα 1.** Σχηματίζουμε τον ορθογώνιο πίνακα

$$Q_1 = J(1, m, \vartheta)J(1, m - 1, \vartheta) \cdots J(1, 2, \vartheta),$$

που είναι τέτοιος ώστε ο  $A^{(1)} = Q_1 A$  να έχει μηδενικά κάτω από την  $(1, 1)$  είσοδο.

**Βήμα 2.** Σχηματίζουμε τον ορθογώνιο πίνακα

$$Q_2 = J(2, m, \vartheta)J(2, m - 1, \vartheta) \cdots J(2, 3, \vartheta),$$

που είναι τέτοιος ώστε ο  $A^{(2)} = Q_2 A^{(1)}$  να έχει μηδενικά κάτω από την  $(2, 2)$  είσοδο.

**Βήμα k.** Σχηματίζουμε τον ορθογώνιο πίνακα

$$Q_k = J(k, m, \vartheta) \cdots J(k, k + 1, \vartheta),$$

που είναι τέτοιος ώστε ο  $A^{(k)} = Q_k A^{(k-1)}$  να έχει μηδενικά κάτω από την  $(k, k)$  είσοδο. Τότε ο πίνακας  $A^{(s)}$  είναι άνω τριγωνικός.

Για να βρούμε τους πίνακες  $Q$  και  $R$  δουλεύουμε ως εξής: Θέτουμε  $R = A^{(s)}$  (άνω τριγωνικός πίνακας) και  $Q = Q_1^T Q_2^T \cdots Q_s^T$  (ορθογώνιος πίνακας), όπου  $Q_i = J(i, m, \vartheta) J(i, m-1, \vartheta) \cdots J(i, i+1, \vartheta)$  (ορθογώνιοι πίνακες). Τότε

$$Q^T A = Q_s Q_{s-1} \cdots Q_2 Q_1 A = R.$$

Μια αναπαράσταση είναι η εξής:

$$\begin{aligned} A &\xrightarrow{J(1,2,\vartheta)} \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \\ * & * \\ * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{J(1,3,\vartheta)} \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & * \\ * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{J(1,4,\vartheta)} \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & * \\ 0 & * \end{pmatrix} = A^{(1)}, \\ A^{(1)} &\xrightarrow{J(2,3,\vartheta)} \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & 0 \\ 0 & * \end{pmatrix} \xrightarrow{J(2,4,\vartheta)} \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = A^{(2)} = R, \\ Q &= Q_1^T Q_2^T = J^T(1,2,\vartheta) J^T(1,3,\vartheta) J^T(1,4,\vartheta) J^T(2,3,\vartheta) J^T(2,4,\vartheta). \end{aligned}$$

#### Αλγόριθμος 2.2.5. Givens QR Παραγοντοποίηση

##### ΕΙΣΟΔΟΣ

$m \times n$  πίνακας  $A$ .

##### ΕΞΟΔΟΣ

Ο  $n \times n$  άνω τριγωνικός πίνακας  $R$ , που είναι τέτοιος ώστε  $A = QR$ .

##### ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ

Πάνω στον πίνακα  $A$ .

**for**  $k = 1, 2, \dots, \min\{m-1, n\}$  **do**

**for**  $l = k+1, \dots, m$  **do**

1. Εύρεση των  $2 \times 2$  μετασχηματισμών Givens που δρουν στα  $\alpha_{kk}$  και  $\alpha_{kl}$  έτσι ώστε  $\alpha_{kl} = 0$ :

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{kk} \\ \alpha_{kl} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix}.$$

2. Αποθήκευση των δεικτών  $k, l, s, c$ .

3. Σχηματισμός του πίνακα  $J(k, l, \vartheta) \in \mathbb{R}^{m \times m}$  και ενημέρωση του  $A$ :

$$A \equiv J(k, l, \vartheta)A.$$

**end for**

**end for**

**Πολυπλοκότητα**

$$3n^2 \left(m - \frac{n}{3}\right) \text{ flops.}$$

## 2.3 Μετασχηματισμός Gram-Schmidt

Η μέθοδος classical Gram-Schmidt (CGS), με αρχή ένα σύνολο από  $n$  γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα  $\{\alpha_k\}$ , παράγει ένα σύνολο από  $n$  ορθοκανονικά διανύσματα  $\{q_k\}$ , τέτοια ώστε

$$\text{span}\{q_1, q_2, \dots, q_i\} = \text{span}\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_i\}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Τα διανύσματα  $q_1, q_2, \dots, q_n$  ορίζονται ως εξής:

**Βήμα 1.** Ορίζουμε

$$q_1 = \frac{\alpha_1}{\|\alpha_1\|_2} = \frac{\alpha_1}{r_{11}}.$$

**Βήμα 2.** Βρίσκουμε διάνυσμα  $q_2$ , το οποίο έχει μοναδιαία νόρμα και είναι ορθογώνιο στο  $q_1$ , δηλαδή  $\|q_2\| = 1$  και  $q_1^T q_2 = 0$ . Ορίζουμε

$$\hat{q}_2 = \alpha_2 - r_{12}q_1, \quad \text{όπου} \quad r_{12} = q_1^T \alpha_2.$$

και κανονικοποιώντας έχουμε ότι

$$q_2 = \frac{\hat{q}_2}{\|\hat{q}_2\|_2} = \frac{\hat{q}_2}{r_{22}}.$$

**Βήμα 3.** Βρίσκουμε διάνυσμα  $q_3$ , το οποίο έχει μοναδιαία νόρμα και είναι ορθογώνιο στο  $q_1$  και στο  $q_2$ . Ορίζουμε

$$\hat{q}_3 = \alpha_3 - r_{13}q_1 - r_{23}q_2, \quad \text{όπου} \quad r_{13} = q_1^T \alpha_3 \quad \text{και} \quad r_{23} = q_2^T \alpha_3.$$

και κανονικοποιώντας έχουμε ότι

$$q_3 = \frac{\hat{q}_3}{\|\hat{q}_3\|_2} = \frac{\hat{q}_3}{r_{33}}.$$

**Βήμα k.** Ορίζουμε

$$\hat{q}_k = \alpha_k - \sum_{i=1}^{k-1} r_{ik}q_i$$

και κανονικοποιώντας έχουμε ότι

$$q_k = \frac{\hat{q}_k}{r_{kk}}.$$

### 2.3α' Μέθοδος Gram-Schmidt για QR παραγοντοποίηση

Η διαδικασία της CGS δίνει μια QR παραγοντοποίηση του πίνακα  $A$ . Έστω λοιπόν ο πίνακας

$$A = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{R}^{m \times n}$$



και οι σχέσεις

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= q_1 r_{11}, \\ \alpha_2 &= q_1 r_{12} + q_2 r_{22}, \\ &\vdots \\ \alpha_k &= q_1 r_{1k} + q_2 r_{2k} + \cdots + q_k r_{kk}, \quad k = 3, 4, \dots, n.\end{aligned}$$

Σε μορφή πινάκων έχουμε

$$(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = (q_1, q_2, \dots, q_n) \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{pmatrix},$$

δηλαδή  $A = Q_1 R_1$ , όπου ο  $Q_1$  είναι  $m \times n$  ορθογώνιος πίνακας και ο  $R_1$  είναι  $n \times n$  άνω τριγωνικός πίνακας.

#### Αλγόριθμος 2.3.1. CGS QR Παραγοντοποίηση

ΕΙΣΟΔΟΣ

$A = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $\text{rank}(A) = n$ .

ΕΞΟΔΟΣ

Η QR παραγοντοποίηση  $A = QR$ ,  $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

```

for  $k = 1, 2, \dots, n$  do
  for  $i = 1, 2, \dots, k - 1$  do
     $r_{ik} \equiv q_i^T \alpha_k$ 
  end for
   $q_k \equiv \alpha_k - \sum_{i=1}^{k-1} r_{ik} q_i$ 
   $r_{kk} = \|q_k\|_2$ 
   $q_k \equiv \frac{q_k}{r_{kk}}$ 
end for
```

Ο αλγόριθμος αυτός παρουσιάζει πολλών ειδών αριθμητικές δυσκολίες. Κατά τον υπολογισμό των διανυσμάτων  $q_k$ , μπορούν να υπάρξουν καταστροφικές διαγραφές ψηφίων και να χαθεί πλήρως η ορθογωνιότητα. Παρόλα αυτά, μπορούμε να τροποποιήσουμε τον αλγόριθμο CGS και να έχουμε καλύτερα αριθμητικά αποτελέσματα. Ο επόμενος αλγόριθμος είναι γνωστός ως modified Gram-Schmidt (MGS).

**Αλγόριθμος 2.3.2. MGS QR Παραγοντοποίηση**ΕΙΣΟΔΟΣ $A = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{R}^{m \times n}, \text{rank}(A) = n.$ ΕΞΟΔΟΣΗ QR παραγοντοποίηση  $A = QR$ ,  $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .Θέτω  $q_k = \alpha_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, n$ .**for**  $k = 1, 2, \dots, n$  **do** $r_{kk} = \|q_k\|_2$  $q_k \equiv \frac{q_k}{r_{kk}}$ **for**  $j = k + 1, \dots, n$  **do** $r_{kj} \equiv q_k^T q_j$  $q_j \equiv q_j - r_{kj} q_k$ **end for****end for****Πολυπλοκότητα** $2mn^2$  flops.

## 2.4 Μετασχηματισμοί Arnoldi και Lanczos

### 2.4α' Ορισμοί

**Ορισμός 2.4.1.** Για  $n \times n$  πίνακα  $A$  και για  $n \times 1$  διάνυσμα  $x$ , η ακολουθία

$$\{x, Ax, \dots, A^{n-1}x\}$$

ονομάζεται **ακολουθία Krylov** και ο πίνακας

$$(x, Ax, \dots, A^{n-1}x) = K_n(A, x)$$

ονομάζεται **πίνακας Krylov**. Ο υπόχωρος

$$\mathcal{K}(A, x) = \text{span} \{x, Ax, \dots, A^{m-1}x\}$$

ονομάζεται **υπόχωρος Krylov** διάστασης  $m$ , υποθέτοντας ότι τα διανύσματα είναι ανεξάρτητα.

Δύο βασικές μέθοδοι για τον υπολογισμό του υπόχωρου Krylov είναι η μέθοδος Arnoldi και η μέθοδος Lanczos. Όταν ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός και επιλέξουμε το ίδιο αρχικό διάνυσμα, οι μέθοδοι ταυτίζονται.

### 2.4β' Μέθοδος Arnoldi

Δεδομένου ενός πίνακα  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , ενός μη μηδενικού διανύσματος  $v$  και ενός ακεραίου  $m \leq n$ , η ιδέα είναι να κατασκευάσουμε ένα σύνολο από  $m+1$  ορθοκανονικά διανύσματα  $\{v_1, v_2, \dots, v_{m+1}\}$  και έναν  $(m+1) \times m$  πίνακα Hessenberg  $\tilde{H}_m$  έτσι ώστε, αν  $V_m = (v_1, v_2, \dots, v_m)$  και  $V_{m+1} = (v_1, v_2, \dots, v_m, v_{m+1})$ , τότε

$$AV_m = V_{m+1}\tilde{H}_m$$

ή

$$A(v_1, v_2, \dots, v_m) = (v_1, v_2, \dots, v_m, v_{m+1}) \begin{pmatrix} h_{11} & \cdots & h_{1m} \\ h_{21} & & \vdots \\ & \ddots & \vdots \\ & & h_{m+1,m} \end{pmatrix}.$$

Από τα παραπάνω προκύπτει ότι, αν θέσουμε  $v_1 = \frac{v}{\|v\|_2}$ , τότε μπορούμε να υπολογίσουμε, στο  $k$  βήμα, το διάνυσμα  $v_{k+1}$  και την  $k$  στήλη του  $\tilde{H}_m$ , συγκρίνοντας τις εισόδους των στηλών, όπως ακριβώς φαίνεται παρακάτω.

**Βήμα 1.** Υπολογισμός του  $v_2$  και των εισόδων της πρώτης στήλης του  $\tilde{H}_m$ . Συγκρίνοντας τις εισόδους της πρώτης στήλης και στα δύο μέλη της παραπάνω εξίσωσης έχουμε

$$Av_1 = h_{11}v_1 + h_{21}v_2.$$

Πολλαπλασιάζοντας με  $v_1^T$  έχουμε

$$v_1^T Av_1 = h_{11} \quad \text{αφού} \quad v_1^T v_1 = 1 \quad \text{και} \quad v_1^T v_2 = 0.$$

Ορίζουμε

$$\hat{v} = Av_1 - h_{11}v_1$$

και έτσι  $h_{21} = \|\hat{v}\|_2$ . Επιπλέον, θέτουμε

$$v_2 = \frac{\hat{v}}{h_{21}} = \frac{\hat{v}}{\|\hat{v}\|_2}.$$

**Βήμα k.** Οι είδοσοι της  $k$  στήλης του πίνακα  $\tilde{H}_m$ , μαζί με το  $v_{k+1}$ , μπορούν να προκύψουν από τη σχέση

$$Av_k = h_{1k}v_1 + \cdots + h_{kk}v_k + h_{k+1,k}v_{k+1}$$

και χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι τα διανύσματα  $\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$  είναι ορθοκανονικά.

Αλγοριθμικά, το  $h_{kk}$  δε θα υπολογιστεί από τη σχέση  $h_{kk} = v_k^T Av_k$  (βλέπε τον επόμενο αλγόριθμο).

Έτσι, η παραπάνω διαδικασία δεν είναι τίποτα άλλο από τη modified Gram-Schmidt για δημιουργία συνόλου ορθοκανονικών διανυσμάτων.

**Αλγόριθμος 2.4.2. Arnoldi Method (Modified Gram-Schmidt Version)**ΕΙΣΟΔΟΣ(i)  $n \times n$  πίνακας  $A$ . (ii)  $n \times 1$  διάνυσμα  $v$ . (iii)  $m$  θετικός ακέραιος με  $m \leq n$ .ΕΞΟΔΟΣ(i) Το σύνολο των  $m + 1$  ορθοκανονικών διανυσμάτων  $\{v_1, v_2, \dots, v_{m+1}\}$ . (ii) Ο  $(m + 1) \times m$  πίνακας Hessenberg  $\tilde{H}_m = (h_{ij})$ .

1. Κανονικοποίηση του διανύσματος  $v$  για να βρούμε το  $v_1$ :  $v_1 = \frac{v}{\|v\|_2}$ .
2. **for**  $k = 1, 2, \dots, m$  **do**  
 $\hat{v} = Av_k$   
**for**  $j = 1, 2, \dots, k$  **do**  
 $h_{j,k} = v_j^T \hat{v}$   
 $\hat{v} = \hat{v} - h_{j,k} v_j$   
**end for**  
 $h_{k+1,k} = \|\hat{v}\|_2$ . Αν  $h_{k+1,k} = 0$ , τερματισμός.  
 $\hat{v}$   
 $v_{k+1} = \frac{\hat{v}}{h_{k+1,k}}$   
**end for**

**Σημαντικά συμπεράσματα για τη μέθοδο Arnoldi**

Έστω

$$V_m = \{v_1, v_2, \dots, v_m\}, \quad V_{m+1} = \{v_1, v_2, \dots, v_m, v_{m+1}\},$$

$H_m$  = ο  $m \times m$  Hessenberg πίνακας που μένει αν  
διαγράψουμε την  $(m + 1)$ -σειρά του πίνακα  $\hat{H}_m$ .

Τότε προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα:

(i) (Παραγοντοποίηση Arnoldi). Η σχέση  $AV_m = V_{m+1}\tilde{H}_m$  γράφεται ισοδύναμα

$$\begin{aligned} AV_m - V_m H_m &= h_{m+1,m}(0, 0, \dots, 0, v_{m+1}) \Leftrightarrow \\ AV_m &= V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T \Leftrightarrow \\ AV_m &= V_m H_m + f_m e_m^T \quad \text{όπου } f_m = h_{m+1,m} v_{m+1,m}. \end{aligned}$$

Η παραγοντοποίηση αυτή ονομάζεται **παραγοντοποίηση Arnoldi**.

- (ii) (QR παραγοντοποίηση του Arnoldi-Krylov πίνακα). Ο πίνακας  $V_m$  είναι τέτοιος ώστε

$$K_m = V_m R_m,$$

όπου  $K_m$  είναι ο πίνακας Krylov  $(b, Ab, \dots, A^{m-1}b)$ . Δηλαδή, ο  $V_m$  είναι ο πίνακας  $Q$  της QR παραγοντοποίησης του πίνακα Krylov  $K_m$ .

- (iii) Από τη σχέση  $AV_m = V_{m+1}\tilde{H}_m$  προκύπτει ότι

$$V_m^T AV_m = H_m.$$

#### 2.4γ' Συμμετρικός αλγόριθμος Lanczos

Όταν ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός, ο αλγόριθμος Arnoldi γίνεται ο συμμετρικός αλγόριθμος Lanczos. Σε αυτήν την περίπτωση, ο πίνακας Hessenberg ανάγεται στο συμμετρικό τριδιαγώνιο πίνακα

$$T_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \beta_{m-1} \\ 0 & & \beta_{m-1} & \alpha_m \end{pmatrix}.$$

Το  $k+1$  επαναληπτικό βήμα της μεθόδου Arnoldi (υποθέτοντας ότι  $\beta_0 v_0 = 0$ ), μπορεί τώρα να γραφτεί:

$$Av_j = \alpha_j v_j + \beta_{j-1} v_{j-1} + \beta_j v_{j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, m.$$

##### Αλγόριθμος 2.4.3. Συμμετρικός Αλγόριθμος Lanczos

###### ΕΙΣΟΔΟΣ

(i) Πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . (ii) Διάνυσμα  $v$ . (iii)  $m$  θετικός ακέραιος με  $m < n$ .

###### ΕΞΟΔΟΣ

(i) Το σύνολο των  $m+1$  ορθοκανονικών διανυσμάτων  $\{v_1, v_2, \dots, v_{m+1}\}$ . (ii) Οι είσοδοι  $\alpha_j$  και  $\beta_j$  του συμμετρικού τριδιαγώνιου πίνακα  $T_m$ .

1. Θέτω  $v_0 = 0$ ,  $\beta_0 = 0$ ,  $v_1 = \frac{v}{\|v\|_2}$ .

2. **for**  $j = 1, 2, \dots, m$  **do**

2.1  $\hat{v}_{j+1} = Av_j - \beta_{j-1}v_{j-1}$ .

2.2  $\alpha_j = v_j^T \hat{v}_{j+1}$ .

2.3  $\hat{v}_{j+1} \equiv \hat{v}_{j+1} - \alpha_j v_j$ .

2.4  $\beta_j = \|\hat{v}_{j+1}\|_2$ . Αν  $\beta_j = 0$ , τερματισμός.

2.5  $v_{j+1} = \frac{\hat{v}_{j+1}}{\beta_j}$ .

**end for**

**Σημαντικά συμπεράσματα για τη μέθοδο Lanczos**

Τα συμπεράσματα για τη μέθοδο Arnoldi γίνονται, για τη μέθοδο Lanczos, τα ακόλουθα:

- (i) (Συμμετρική Lanczos παραγοντοποίηση).  $AV_m = V_{m+1}\tilde{T}_m$ .
- (ii) (QR παραγοντοποίηση του συμμετρικού Lanczos-Krylov πίνακα).  $K_m = V_m R_m$ .
- (iii)  $V_m^T AV_m = T_m$ .

## Κεφάλαιο 3

### Κανονικό πρόβλημα ιδιοτιμών

Στο κεφάλαιο αυτό θα ασχοληθούμε με το κανονικό πρόβλημα ιδιοτιμών  $Ax = \lambda x$ . Σκοπός μας είναι η εύρεση των ιδιοτιμών  $\lambda \in \mathbb{R}$  και των ιδιοδιανυσμάτων  $x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$  του παραπάνω προβλήματος (3.1).

Στην ενότητα 3.2 θα κάνουμε κάποιες παρατηρήσεις για το πού βρίσκονται οι ιδιοτιμές στο μιγαδικό επίπεδο, ενώ στην ενότητα 3.3 θα ασχοληθούμε με τρόπους εύρεσης συγκεκριμένων ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων, για παράδειγμα τις μεγαλύτερες σε τιμή ιδιοτιμές και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα.

Αν όμως χρειαζόμαστε όλες τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα, θα χρησιμοποιήσουμε ορθογώνιους μετασχηματισμούς, όπως φαίνεται στη ενότητα 3.4, προσπαθώντας να αποφύγουμε complex αριθμητική στους υπολογισμούς μας και καταλήγοντας στη real Schur form ενός πίνακα, όπως παρουσιάζεται στην ενότητα 3.7.

Μία άλλη μέθοδος εύρεσης ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων παρουσιάζεται στην ενότητα 3.9, η οποία χρησιμοποιεί την παραγοντοποίηση Arnoldi για την υλοποίησή της. Η μέθοδος αυτή είναι καταλληλότερη αν έχουμε μεγάλους και αραιούς πίνακες.

Η βιβλιογραφία που χρησιμοποιήθηκε είναι [14], [5] σελ. 281-336, σελ. 473-477, [16] σελ. 61-79, σελ. 104-113, σελ. 116-126, [15] σελ. 562-568, σελ. 601-611, [9] σελ. 317-325. Εφαρμογές του κανονικού προβλήματος ιδιοτιμών βρίσκονται στο [18] σελ. 235-257 καθώς και πληροφορίες για το συμμετρικό κανονικό πρόβλημα ιδιοτιμών βρίσκονται στο [4].

#### 3.1 Το πρόβλημα

Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Σκοπός είναι η εύρεση των ιδιοτιμών  $\lambda \in \mathbb{R}$  και των ιδιοδιανυσμάτων  $x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$  με  $x \neq 0$ , έτσι ώστε να ισχύει η σχέση

$$Ax = \lambda x.$$

## 3.2 Εντοπισμός των ιδιοτιμών

### 3.2α' Τα θεωρήματα του Geršgorin

**Θεώρημα 3.2.1 (Πρώτο θεώρημα του Geršgorin).** Έστω πίνακας  $A = (a_{ij})_{n \times n}$ . Ορίζουμε την ποσότητα

$$r_i = \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, \dots, n.$$

Τότε κάθε ιδιοτιμή  $\lambda$  του  $A$  ικανοποιεί τουλάχιστον μία από τις εξισώσεις:

$$|\lambda - a_{ii}| \leq r_i.$$

Δηλαδή, όλες οι ιδιοτιμές του  $A$  μπορούν να βρεθούν στους δίσκους

$$\{z : |z - a_{ii}| \leq r_i, \quad i = 1, \dots, n\}.$$

**Ορισμός 3.2.2.** Οι δίσκοι  $\{z : |z - a_{ii}| \leq r_i, \quad i = 1, \dots, n\}$  ονομάζονται **δίσκοι του Geršgorin** στο μιγαδικό επίπεδο.

**Θεώρημα 3.2.3 (Δεύτερο θεώρημα του Geršgorin).** Υποθέτουμε ότι  $r$  το πλήθος από τους δίσκους του Geršgorin είναι ξένοι με τους υπόλοιπους. Τότε ακριβώς  $r$  το πλήθος ιδιοτιμές του  $A$  βρίσκονται σε αυτούς τους  $r$  δίσκους.

Οι αποδείξεις των θεωρημάτων βρίσκονται στο [17] σελ.251-252.

### 3.2β' Φράγματα και νόρμες πινάκων

**Θεώρημα 3.2.4.** Έστω  $\lambda$  μια ιδιοτιμή του πίνακα  $A$ . Τότε, ισχύει ότι

$$|\lambda| \leq \|A\|.$$

Μάλιστα, και η φασματική ακτίνα  $\rho(A)$  του πίνακα  $A$  είναι φραγμένη από τη νόρμα του, δηλαδή  $\rho(A) \leq \|A\|$ .

**Θεώρημα 3.2.5.** Ισχύει ότι  $\rho(A) \leq \min \left\{ \max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}|, \max_j \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \right\}$ .

## 3.3 Υπολογισμός συγκεκριμένων ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων

Σε πολλές εφαρμογές χρειάζεται να υπολογίσουμε κάποιες ιδιοτιμές ενός πίνακα, συνήθως τις μεγαλύτερες ή μικρότερες σε τιμή, καθώς και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Οι μέθοδοι που θα χρησιμοποιήσουμε για να λύσουμε αυτό το πρόβλημα λειτουργούν καλύτερα αν οι πίνακες είναι αραιοί, αφού οι αλγόριθμοι βασίζονται σε πολλαπλασιασμούς διανυσμάτων με πίνακες.



### 3.3α' Power Method

Η power method χρησιμοποιείται συχνά για να υπολογίσουμε την κυρίαρχη ιδιοτιμή και το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα ενός πίνακα. Έστω οι ιδιοτιμές  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  του πίνακα  $A$ , τέτοιες ώστε να ισχύει

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|.$$

Η ιδιοτιμή  $\lambda_1$  είναι η κυρίαρχη ιδιοτιμή του πίνακα  $A$ . Έστω  $v_1$  το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα και  $\max(g)$  το μεγαλύτερο στοιχείο ενός διανύσματος  $g$ .

#### Αλγόριθμος 3.3.1. Power Method

ΕΙΣΟΔΟΣ

$n \times n$  πίνακας  $A$ .

ΕΞΟΔΟΣ

Η προσέγγιση της κυρίαρχης ιδιοτιμής και το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα.

1. Διαλέγουμε την αρχική προσέγγιση  $x_0$  του ιδιοδιανύσματος.
2. **for**  $k = 1, 2, \dots$  **do**
  - 2.1 Υπολογισμός του  $\hat{x}_k = Ax_{k-1}$ .
  - 2.2 Υπολογισμός του  $x_k = \frac{\hat{x}_k}{\max(\hat{x}_k)}$ .
- end for**

**Θεώρημα 3.3.2.** Καθώς  $k \rightarrow \infty$ , ισχύει ότι  $\max(\hat{x}_k) \rightarrow \lambda_1$  και  $\{x_k\} \rightarrow w_1$ , το οποίο είναι πολλαπλάσιο του  $v_1$ .

*Απόδειξη.* Από το δεύτερο βήμα του αλγόριθμου έχουμε ότι

$$x_k = \frac{A^k x_0}{\max(A^k x_0)}.$$

Υποθέτουμε ότι τα ιδιοδιανύσματα  $v_1, v_2, \dots, v_n$  είναι γραμμικώς ανεξάρτητα. Μπορούμε τότε να γράψουμε  $x_0 = \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_n v_n$ ,  $\alpha_1 \neq 0$ . Έτσι

$$\begin{aligned} A^k x_0 &= A^k (\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_n v_n) = \alpha_1 \lambda_1^k v_1 + \alpha_2 \lambda_2^k v_2 + \dots + \alpha_n \lambda_n^k v_n \\ &= \lambda_1^k \left[ \alpha_1 v_1 + \alpha_2 \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k v_2 + \dots + \alpha_n \left( \frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k v_n \right]. \end{aligned}$$

Αφού η  $\lambda_1$  είναι η κυρίαρχη ιδιοτιμή,  $\left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k \rightarrow 0$  καθώς  $k \rightarrow \infty$ ,  $i = 2, 3, \dots, n$ .

Άρα,  $x_k = \frac{A^k x_0}{\max(A^k x_0)} \rightarrow c v_1$  και  $\max(\hat{x}_k) \rightarrow \lambda_1$ . □

### Σύγκλιση της μεθόδου

Η ταχύτητα σύγκλισης της power method καθορίζεται από το πηλίκο  $\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|$ . Πράγματι,

$$\begin{aligned} \|x_k - \alpha_1 v_1\| &= \left\| \alpha_2 \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k v_2 + \cdots + \alpha_n \left( \frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k v_n \right\| \\ &\leq |\alpha_2| \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k \|v_2\| + \cdots + |\alpha_n| \left| \frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right|^k \|v_n\| \\ &\leq \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k (|\alpha_2| \|v_2\| + \cdots + |\alpha_n| \|v_n\|), \end{aligned}$$

αφού  $\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right| \leq \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|$ ,  $i = 3, 4, \dots, n$ . Άρα έχουμε ότι

$$\|x_k - \alpha_1 v_1\| \leq \alpha \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k, \quad k = 1, 2, 3, \dots,$$

όπου  $\alpha = |\alpha_2| \|v_2\| + \cdots + |\alpha_n| \|v_n\|$ . Αυτό δείχνει ότι η ταχύτητα με την οποία το  $x_k$  πλησιάζει το  $\alpha_1 v_1$  εξαρτάται από το πόσο γρήγορα το πηλίκο  $\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k$  πλησιάζει το 0, δηλαδή αν τα  $\lambda_1$  και  $\lambda_2$  είναι κοντά, τότε η σύγκλιση θα είναι αργή, ενώ αν είναι μακριά η σύγκλιση θα είναι γρήγορη.

### Power Method με Shift

Σε μερικές περιπτώσεις, η ταχύτητα της σύγκλισης μπορεί να βελτιωθεί χρησιμοποιώντας ένα κατάλληλο shift. Έτσι, αν  $\sigma$  είναι το shift έτσι ώστε  $\lambda_1 - \sigma$  να είναι η κυρίαρχη ιδιοτιμή του πίνακα  $A - \sigma I$ , και αν η power method εφαρμοστεί στον πίνακα  $A - \sigma I$ , τότε η ταχύτητα της σύγκλισης θα καθορίζεται από το πηλίκο  $\left| \frac{\lambda_2 - \sigma}{\lambda_1 - \sigma} \right|$  και όχι από το  $\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|$ .

### 3.3β' Inverse Power Method/Inverse Iteration

Η επαναληπτική αυτή μέθοδος χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του ιδιοδιανύσματος όταν είναι γνωστή μία καλή προσέγγιση της ιδιοτιμής. Στην πραγματικότητα είναι η power method εφαρμοσμένη στον πίνακα  $(A - \sigma I)^{-1}$ .

**Αλγόριθμος 3.3.3. Inverse Iteration**ΕΙΣΟΔΟΣ

(i) Μία προσέγγιση  $\sigma$  της ιδιοτιμής  $\lambda$  έτσι ώστε  $|\lambda_i - \sigma| \ll |\lambda_1 - \sigma|$ ,  $i \neq 1$ .  
 (ii) Ανοχή σφάλματος  $\epsilon$  και αριθμός  $N$  των επαναλήψεων. (iii) Αρχική προσέγγιση  $x_0$  του ιδιοδιανύσματος.

ΕΞΟΔΟΣ

Προσέγγιση  $x_k$  του ιδιοδιανύσματος που αντιστοιχεί στη  $\sigma$ .

1. Επιλογή της αρχικής προσέγγισης  $x_0$  του ιδιοδιανύσματος.
2. **for**  $k = 1, 2, \dots$ , **do**
  - 2.1 Επίλυση του  $(A - \sigma I) \hat{x}_k = x_{k+1}$ .
  - 2.2 Κανονικοποίηση του διανύσματος  $x_k = \frac{\hat{x}_k}{\|\hat{x}_k\|_2}$ .
  - 2.3 Διακοπή της διαδικασίας αν  $\|Ax_k - \sigma x_k\| < \epsilon$  ή αν  $k > N$ .
- end for**

**Θεώρημα 3.3.4.** Η ακολουθία  $\{x_k\}$  συγκλίνει στο ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda_1$ .

*Απόδειξη.* Οι ιδιοτιμές του πίνακα  $(A - \sigma I)^{-1}$  είναι οι  $(\lambda_1 - \sigma)^{-1}$ ,  $(\lambda_2 - \sigma)^{-1}$ , ...,  $(\lambda_n - \sigma)^{-1}$  και τα ιδιοδιανύσματα του είναι τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα  $A$ . Άρα μπορούμε να γράψουμε ότι

$$\begin{aligned} \hat{x}_k &= \frac{c_1}{(\lambda_1 - \sigma)^k} v_1 + \frac{c_2}{(\lambda_2 - \sigma)^k} v_2 + \dots + \frac{c_n}{(\lambda_n - \sigma)^k} v_n \\ &= \frac{1}{(\lambda_1 - \sigma)^k} \left[ c_1 v_1 + c_2 \left( \frac{\lambda_1 - \sigma}{\lambda_2 - \sigma} \right)^k v_2 + \dots + c_n \left( \frac{\lambda_1 - \sigma}{\lambda_n - \sigma} \right)^k v_n \right]. \end{aligned}$$

Αφού η  $\lambda_1$  είναι πιο κοντά στη  $\sigma$  από οποιαδήποτε άλλη ιδιοτιμή, ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους είναι ο κυρίαρχος και έτσι το  $x_k$  συγκλίνει στο  $v_1$ , το οποίο είναι τελικά αυτό που θέλουμε να υπολογίσουμε.  $\square$

**Επιλογή του αρχικού διανύσματος  $x_0$** 

Για να διαλέξουμε το αρχικό διάνυσμα  $x_0$ , μπορούμε κάνουμε κάποιες επαναλήψεις της power method και στη συνέχεια να χρησιμοποιήσουμε το τελευταίο διάνυσμα της power method σαν αρχικό διάνυσμα της inverse iteration.

### 3.3γ' Rayleigh Quotient

**Θεώρημα 3.3.5.** Έστω  $A$  ένας συμμετρικός πίνακας και έστω  $x$  μια καλή προσέγγιση ενός ιδιοδιανύσματος. Τότε το πηλίκο

$$R_q = \sigma = \frac{x^T A x}{x^T x}$$

είναι μία καλή προσέγγιση της ιδιοτιμής  $\lambda$  που αντιστοιχεί στο ιδιοδιάνυσμα  $x$ .

*Απόδειξη.* Αφού ο  $A$  είναι συμμετρικός, υπάρχουν τα ορθογώνια ιδιοδιανύσματα  $v_1, v_2, \dots, v_n$ . Άρα μπορούμε να γράψουμε  $x = c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n$ . Υποθέτουμε ότι τα  $v_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  είναι κανονικοποιημένα, δηλαδή  $v_i^T v_i = 1$ . Τότε, αφού  $A v_i = \lambda_i v_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  και  $v_i^T v_j = 0$  για  $i \neq j$  έχουμε

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{x^T A x}{x^T x} = \frac{(c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n)^T A (c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n)}{(c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n)^T (c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n)} \\ &= \frac{(c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n)^T (c_1 \lambda_1 v_1 + c_2 \lambda_2 v_2 + \dots + c_n \lambda_n v_n)}{c_1^2 + c_2^2 + \dots + c_n^2} \\ &= \frac{\lambda_1 c_1^2 + \lambda_2 c_2^2 + \dots + \lambda_n c_n^2}{c_1^2 + c_2^2 + \dots + c_n^2} \\ &= \lambda_1 \left[ \frac{1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right) \left(\frac{c_2}{c_1}\right)^2 + \dots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right) \left(\frac{c_n}{c_1}\right)^2}{1 + \left(\frac{c_2}{c_1}\right)^2 + \dots + \left(\frac{c_n}{c_1}\right)^2} \right]. \end{aligned}$$

Αφού το  $x$  είναι μία καλή προσέγγιση του ιδιοδιανύσματος  $v_1$ , το  $c_1$  είναι μεγαλύτερο από τα  $c_i$ ,  $i = 2, \dots, n$ . Έτσι, η έκφραση στην αγκύλη είναι κοντά στο 1, που σημαίνει ότι η  $\sigma$  είναι κοντά στην ιδιοτιμή  $\lambda_1$ .  $\square$

**Ορισμός 3.3.6.** Το πηλίκο  $R_q = \frac{x^T A x}{x^T x}$  ονομάζεται **Rayleigh quotient**.

### Rayleigh Quotient Iteration

Η ιδέα της προσέγγισης της ιδιοτιμής ενός συμμετρικού πίνακα μπορεί να συνδυαστεί με τη μέθοδο inverse iteration για να υπολογίσουμε προσεγγίσεις της ιδιοτιμής και του αντίστοιχου ιδιοδιανύσματος. Δηλαδή, αν ξεκινήσουμε με ένα αρχικό διάνυσμα, μέσω του Rayleigh quotient παίρνουμε μια προσέγγιση της ιδιοτιμής. Με αυτή την προσέγγιση εφαρμόζουμε inverse iteration και παίρνουμε προσέγγιση του ιδιοδιανύσματος κ.ο.κ.

**Αλγόριθμος 3.3.7. Rayleigh Quotient Iteration**ΕΙΣΟΔΟΣ

(i) Συμμετρικός πίνακας  $A$ . (ii) Μέγιστος αριθμός  $N$  των επαναλήψεων. (iii) Αρχική προσέγγιση  $x_0$  του ιδιοδιανύσματος.

ΕΞΟΔΟΣ

Μία προσέγγιση ιδιοτιμής και ιδιοδιανύσματος.

**for**  $k = 0, 1, 2, \dots$ , **do**

1. Υπολογισμός του  $\sigma_k = \frac{x_k^T A x_k}{x_k^T x_k}$  (Rayleigh quotient).
2. Επίλυση του  $(A - \sigma_k I)\hat{x}_{k+1} = x_k$  για την εύρεση του  $\hat{x}_{k+1}$  (inverse iteration).
3. Κανονικοποίηση  $x_{k+1} = \frac{\hat{x}_{k+1}}{\max(\hat{x}_{k+1})}$ .
4. Διακοπή της διαδικασίας αν το  $(\sigma_k, x_k)$  είναι αποδεκτό ζευγάρι ιδιοτιμής και ιδιοδιανύσματος ή αν  $k > N$ .

**end for**

**Πολυπλοκότητα**

$n^3$  flops.

**Επιλογή του αρχικού διανύσματος  $x_0$** 

Για να διαλέξουμε το αρχικό διάνυσμα  $x_0$ , μπορούμε κάνουμε κάποιες επαναλήψεις της power method και στη συνέχεια να χρησιμοποιήσουμε το τελευταίο διάνυσμα της power method σαν αρχικό διάνυσμα της Rayleigh quotient iteration.

**3.4 Μετασχηματισμοί ομοιότητας**

Η ιδέα για να υπολογίσουμε τις ιδιοτιμές ενός πίνακα είναι να τον μετατρέψουμε σε μία απλούστερη μορφή, χρησιμοποιώντας μετασχηματισμούς ομοιότητας, μέσω των οποίων είναι πιο εύκολοι οι υπολογισμοί.

**Θεώρημα 3.4.1.** Όμοιοι πίνακες έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές.

**3.4α' Διαγωνοποίηση**

**Ορισμός 3.4.2.** Ένας πίνακας  $A$  ονομάζεται **διαγωνίσιμος** αν

$$X^{-1}AX = D,$$

όπου  $D$  διαγώνιος πίνακας. Η παραγοντοποίηση αυτή ονομάζεται **παραγοντοποίηση των ιδιοτιμών (eigenvalue decomposition)**.

**Ορισμός 3.4.3.** Η **αλγεβρική πολλαπλότητα** μίας ιδιοτιμής  $\lambda$  είναι το πλήθος των φορών που εμφανίζεται το  $\lambda$  σαν ρίζα του χαρακτηριστικού πολυωνύμου του  $A$ . Η **γεωμετρική πολλαπλότητα** είναι η διάσταση του χώρου  $\ker(A - \lambda I)$ .

**Ορισμός 3.4.4.** Μία ιδιοτιμή ονομάζεται **ελλιπής (defective eigenvalue)** αν η γεωμετρική της πολλαπλότητα είναι μικρότερη της αλγεβρικής και ένας **πίνακας** ονομάζεται **ελλιπής (defective matrix)** αν έχει μία ελλιπή ιδιοτιμή. Αλλιώς ονομάζεται **μη ελλιπής (nondefective)**.

**Θεώρημα 3.4.5.** Ένας πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  είναι διαγωνίσιμος αν και μόνο αν είναι μη ελλιπής.

**Θεώρημα 3.4.6 (Κανονική μορφή Jordan).** Αν  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , τότε υπάρχει αντιστρέψιμος πίνακας  $X$  τέτοιος ώστε  $X^{-1}AX = \text{diag}(J_1, \dots, J_k)$ , όπου

$$J_i = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & \ddots & 1 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & \lambda_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2, \dots, k.$$

Αν ο πίνακας  $J_i$  είναι τάξης  $p_i$ , τότε  $p_1 + p_2 + \cdots + p_k = n$ . Οι πίνακες  $J_i$  ονομάζονται **πίνακες Jordan block**. Η  $\lambda_i$  είναι ιδιοτιμή του  $J_i$  με πολλαπλότητα  $p_i$ .

### Αστάθεια της διαγωνοποίησης

Το επόμενο θεώρημα δείχνει ότι η κατάσταση του πίνακα  $X$  επηρεάζει τον υπολογισμό των ιδιοτιμών ενός πίνακα. Για το λόγο αυτό πρέπει να αποφεύγεται η διαγωνοποίηση μέσω της Jordan κανονικής μορφής. Όταν ο πίνακας  $A$  είναι ελλιπής, η εύρεση του  $X$  γίνεται ένα ill-conditioned πρόβλημα.

**Θεώρημα 3.4.7.** Ισχύει ότι

$$\|X^{-1}AX - A\| = \|X^{-1}E\|,$$

όπου

$$\|E\|_2 \cong \mu \|X\|_2 \|X^{-1}\|_2.$$

### 3.4β' Hessenberg αναγωγή μέσω ορθογώνιων μετασχηματισμών

**Θεώρημα 3.4.8 (Αναγωγή Hessenberg).** Ένας τυχαίος  $n \times n$  πίνακας μπορεί πάντα να μετασχηματιστεί σε έναν άνω Hessenberg πίνακα  $H_u$  με ορθογώνιους μετασχηματισμούς. Δηλαδή υπάρχει ορθογώνιος πίνακας  $P$  τέτοιος ώστε

$$PAP^T = H_u.$$

Η σημασία της αναγωγής Hessenberg έγκειται στο ότι οι μετασχηματισμοί είναι ορθογώνιοι και πρέπει να εφαρμοστεί πριν την QR παραγοντοποίηση.

### Hessenberg αναγωγή μέσω Householder

Η ιδέα είναι να ανάγουμε τον πίνακα  $A$  σε έναν πίνακα άνω Hessenberg πολλαπλασιάζοντας από αριστερά με πίνακες Householder και από δεξιά με τους αναστροφικούς των πινάκων αυτών. Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Τότε ο αλγόριθμος χρειάζεται  $n-2$  βήματα για να υλοποιηθεί.

**Βήμα 1.** Βρίσκουμε πίνακα Householder  $\hat{P}_1$  τάξης  $n-1$ , ο οποίος είναι τέτοιος ώστε

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

Ορίζουμε  $P_1 = \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & \hat{P}_1 \end{pmatrix}$  και υπολογίζουμε το γινόμενο  $A^{(1)} = P_1 A P_1^T$ . Τότε έχουμε

$$A \equiv A^{(1)} = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ * & * & \cdots & * \\ 0 & \alpha_{32} & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \\ 0 & \alpha_{n2} & \cdots & * \end{pmatrix}.$$

**Βήμα 2.** Βρίσκουμε πίνακα Householder  $\hat{P}_2$  τάξης  $n-2$ , ο οποίος είναι τέτοιος ώστε

$$\hat{P}_2 = \begin{pmatrix} \alpha_{32} \\ \alpha_{42} \\ \vdots \\ \alpha_{n2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ορίζουμε  $P_2 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & \hat{P}_2 \end{pmatrix}$  και υπολογίζουμε το γινόμενο  $A^{(2)} = P_2 A P_2^T$ . Τότε έχουμε

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

Μετά από  $n-2$  βήματα, ο πίνακας  $A^{(n-2)}$  είναι ο άνω Hessenberg πίνακας  $H_u$ . Θέτοντας  $P = P_{n-2} P_{n-3} \cdots P_2 P_1$ , ο οποίος είναι ορθογώνιος, προκύπτει

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

**Αλγόριθμος 3.4.9. Αναγωγή Hessenberg με Householder**ΕΙΣΟΔΟΣ $n \times n$  πίνακας  $A$ .ΕΞΟΔΟΣΟ  $n \times n$  άνω Hessenberg πίνακας.ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗΠάνω στον πίνακα  $A$ .**for**  $k = 1, 2, \dots, n - 2$  **do**1. Καθορισμός του διανύσματος  $u_k = (u_{k+1,k}, \dots, u_{n,k})^T$  που ορίζει τον πίνακα

$$\hat{P}_k = I_k - 2 \frac{u_k u_k^T}{u_k^T u_k}, \text{ τάξης } n - k, \text{ και ενός βαθμωτού } \sigma \text{ έτσι ώστε}$$

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

2. Αποθήκευση του  $\sigma$  πάνω στο  $\alpha_{k+1,k}$ , δηλαδή  $\alpha_{k+1,k} \equiv \sigma$ .3. Υπολογισμός του  $\beta = \frac{2}{u_k^T u_k}$  και αποθήκευση των  $u_k$  και  $\beta_k$ .4. Ενημέρωση των εισόδων του πίνακα  $A$  στις σειρές από  $k + 1$  έως  $n$  και στις στήλες από  $k + 1$  έως  $n$  με πολλαπλασιασμό από αριστερά και μετά στις στήλες από  $k + 1$  έως  $n$  και στις γραμμές από 1 έως  $n$  με πολλαπλασιασμό από δεξιά. Αποθήκευση των εισόδων αυτών πάνω στις εισόδους του πίνακα  $A$ :

$$A(k + 1 : n, k : n) = A(k + 1 : n, k : n) - \beta_k u_k u_k^T A(k + 1 : n, k : n),$$

$$A(1 : n, k + 1 : n) = A(1 : n, k + 1 : n) - \beta_k A(1 : n, k + 1 : n) u_k u_k^T.$$

**end for****Πολυπλοκότητα**
 $\frac{10}{3}n^3$  flops. Αν πρέπει να υπολογιστεί και ο πίνακας  $P$ , απαιτούνται επιπλέον  $\frac{4}{3}n^3$  flops.
**Εξασφάλιση του πίνακα  $P$** 

Ο αλγόριθμος δεν παράγει τον πίνακα  $P$  απευθείας. Αν χρειαστεί να τον υπολογίσουμε, τότε  $P = P_{n-2}P_{n-3} \cdots P_2P_1$ , όπου  $P_k = \text{diag}(I_k, I - \beta_k u_k u_k^T)$ ,  $k = 1, 2, \dots, n - 2$ .



### Hessenberg αναγωγή συμμετρικού πίνακα

Όταν ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός, τότε από τη σχέση  $PAP^T = H_u$ , προκύπτει ότι και ο άνω Hessenberg πίνακας  $H_u$  είναι και αυτός συμμετρικός, άρα τριδιαγώνιος. Έτσι, πριν εφαρμόσουμε τον αλγόριθμο, μπορούμε να εκμεταλλευτούμε τη δομή του και να μειώσουμε το χώρο αποθήκευσης των πινάκων  $A^{(k)}$ . Ο συμμετρικός αλγόριθμος χρειάζεται  $\frac{4}{3}n^3$  flops για να υπολογίσει τον  $H_u$  και είναι ευσταθής.

### Hessenberg αναγωγή μέσω Givens

Για να μετατρέψουμε έναν πίνακα σε άνω Hessenberg, μπορούμε να εφαρμόσουμε και μετασχηματισμό Givens. Όμως η διαδικασία θα κοστίσει  $\frac{20}{3}n^3$  flops για να υπολογιστεί ο  $H_u$ .

### Μοναδικότητα της αναγωγής Hessenberg

**Θεώρημα 3.4.10 (Implicit Q).** Έστω  $V = (v_1, v_2, \dots, v_n)$  και  $Q = (q_1, q_2, \dots, q_n)$  δύο ορθογώνιοι πίνακες για τους οποίους ισχύει  $V^T AV = G$  και  $Q^T AQ = H$ , όπου  $G$  και  $H$  άνω Hessenberg. Έστω  $k$  ο μικρότερος θετικός ακέραιος για τον οποίο ισχύει  $h_{k+1,k} = 0$ , με τη σύμβαση ότι αν  $k = n$ , τότε ο  $H$  είναι μη ανηγμένος. Αν  $q_1 = v_1$ , τότε  $q_i = \pm v_i$  και  $|h_{i,i-1}| = |g_{i,i-1}|$  για  $i = 2, \dots, k$ . Επίσης, αν  $k < n$  τότε  $g_{k+1,k} = 0$ .

*Απόδειξη.* Ορίζουμε τον ορθογώνιο πίνακα  $W = (w_1, w_2, \dots, w_n) = V^T Q$  και παρατηρούμε ότι  $GW = WH$ . Συγκρίνοντας τις  $i-1$  στήλες στα δύο μέλη της εξίσωσης για  $i = 2, \dots, k$ , βλέπουμε ότι

$$h_{i,i-1}w_i = Gw_{i-1} - \sum_{j=1}^{i-1} h_{j,i-1}w_j.$$

Αφού  $w_1 = e_1$ , προκύπτει ότι ο  $W = (w_1, w_2, \dots, w_n)$  είναι άνω τριγωνικός πίνακας και άρα  $w_i = \pm e_i$  για  $i = 2, \dots, k$ . Καθώς ισχύουν οι σχέσεις  $w_1 = V^T q_1$  και  $h_{i,i-1} = w_i^T G w_{i-1}$ , παρατηρούμε ότι  $v_i = \pm q_i$  και

$$|h_{i,i-1}| = |q_i^T A q_{i-1}| = |v_i^T A v_{i-1}| = |g_{i,i-1}|$$

για  $i = 2, \dots, k$ . Αν  $k < n$  τότε

$$\begin{aligned} g_{k+1,k} &= e_{k+1}^T G e_k = e_{k+1}^T G W e_k = e_{k+1}^T W H e_k \\ &= e_{k+1}^T \sum_{i=1}^k h_{ik} W e_i = \sum_{i=1}^k h_{ik} e_{k+1}^T e_i = 0. \end{aligned}$$

□

Το θεώρημα implicit Q ουσιαστικά αναφέρει ότι οι πίνακες  $G$  και  $H$  είναι σχεδόν ίδιοι, υπό την έννοια ότι  $G = D^{-1}HD$ , όπου  $D = \text{diag}(\pm 1, \dots, \pm 1)$ .

### 3.5 Ευαισθησία των ιδιοτιμών

#### 3.5α' Το θεώρημα Bauer-Fike

**Θεώρημα 3.5.1 (Bauer και Fike).** Έστω πίνακας  $A$  διαγωνίσιμος, δηλαδή υπάρχει αντιστρέψιμος πίνακας  $X$  τέτοιος ώστε

$$X^{-1}AX = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n).$$

Τότε για μία ιδιοτιμή  $\lambda$  του  $A + E$  έχουμε ότι

$$\min |\lambda_i - \lambda| \leq \|X\| \|X^{-1}\| \|E\|,$$

όπου  $\|\cdot\|$  είναι η νόρμα πίνακα και  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  οι ιδιοτιμές του  $A$ .

Το παραπάνω θεώρημα τονίζει ότι αν ο δείκτης κατάστασης

$$\text{Cond}_p(X) = \|X\|_p \|X^{-1}\|_p$$

είναι μεγάλος, τότε η ιδιοτιμή  $\lambda$  του διαταραγμένου πίνακα  $A + E$  μπορεί να είναι τελείως διαφορετική από μια ιδιοτιμή  $\lambda_i$  του  $A$ .

#### 3.5β' Ευαισθησία μεμονωμένων ιδιοτιμών

Έστω  $X^{-1}AX = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ . Τότε τα κανονικοποιημένα αριστερά και δεξιά ιδιοδιανύσματα των ιδιοτιμών  $\lambda_i$  δίνονται από τους τύπους

$$x_i = \frac{Xe_i}{\|Xe_i\|_2}, \quad y_i = \frac{(X^{-1})^T e_i}{\|(X^{-1})^T e_i\|_2}.$$

**Ορισμός 3.5.2.** Ο αριθμός  $\frac{1}{s_i}$ , όπου το  $s_i$  δίνεται από τον τύπο

$$s_i = |y_i^T x_i|,$$

ονομάζεται **δείκτης κατάστασης της ιδιοτιμής  $\lambda_i$** .

#### Σχέση μεταξύ $s_i$ και $\text{Cond}(X)$

Είναι εύκολο να δούμε ότι οι δείκτες κατάστασης  $s_i$  και  $\text{Cond}_2(X)$  σχετίζονται άμεσα. Πράγματι,

$$s_i = |y_i^T x_i| = \frac{|e_i^T X^{-1} X e_i|}{\|Xe_i\|_2 \|(X^{-1})^T e_i\|_2} = \frac{1}{\|Xe_i\|_2 \|(X^{-1})^T e_i\|_2}.$$

Ισχύει ότι

$$\|Xe_i\|_2 \leq \|X\|_2 \|e_i\|_2 = \|X\|_2$$

και

$$\|(X^{-1})^T e_i\|_2 \leq \|(X^{-1})^T\|_2 \|e_i\|_2 = \|(X^{-1})^T\|_2 = \|X^{-1}\|_2.$$

Άρα,

$$\frac{1}{s_i} \leq \|X\|_2 \|X^{-1}\|_2 = \text{Cond}_2(X).$$

### 3.5γ' Ευαισθησία ιδιοτιμών κανονικού πίνακα

**Ορισμός 3.5.3.** Ένας πίνακας ονομάζεται **κανονικός** αν  $A^*A = AA^*$ , όπου  $A^* = (\bar{A})^T$ .

**Πόρισμα 3.5.4.** Έστω  $A$  κανονικός πίνακας και έστω  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  οι ιδιοτιμές του. Τότε για μία ιδιοτιμή  $\lambda$  του  $A + E$  έχουμε ότι

$$\min |\lambda_i - \lambda| \leq \|E\|_2.$$

## 3.6 Ευαισθησία των ιδιοδιανυσμάτων

**Θεώρημα 3.6.1.** Έστω  $\Delta A$  μια πολύ μικρή διαταραχή του πίνακα  $A$  και έστω ότι η ιδιοτιμή  $\lambda_k$  του  $A$  είναι διαταραγμένη κατά  $\delta\lambda_k$ , δηλαδή η ποσότητα  $\lambda_k + \delta\lambda_k$  είναι ιδιοτιμή του  $A + \Delta A$ . Έστω, επίσης, ότι το  $x_k + \delta x_k$  είναι το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda_k + \delta\lambda_k$ . Τότε, υποθέτοντας ότι οι ιδιοτιμές του  $A$  είναι διακριτές, έχουμε ότι

$$x_k + \delta x_k = x_k + \sum_{j \neq k} \frac{\alpha_{jk}}{(\lambda_k - \lambda_j)s_i} x_j + O(\|\Delta A\|^2),$$

όπου  $\alpha_{jk} = y_i^*(\Delta A)x_j$ .

Το παραπάνω θεώρημα τονίζει ότι αν διαταραχθεί ελάχιστα ο αρχικός πίνακας, τότε η διαταραχή του ιδιοδιανύσματος εξαρτάται από το δείκτη κατάστασης όλων των ιδιοτιμών, όχι μόνο της  $\lambda_k$ , αλλά και την απόσταση της  $\lambda_k$  από τις άλλες ιδιοτιμές. Άμεση συνέπεια του θεωρήματος είναι ότι, αν προκύψει ιδιοτιμή με πολλαπλότητα ή μία ιδιοτιμή είναι κοντά σε μία άλλη, το πρόβλημα είναι ill-conditioned.

## 3.7 Κανονική μορφή Schur και QR iterations

Όπως έχουμε δει, ο υπολογισμός των ιδιοτιμών μέσω της Jordan κανονικής μορφής δεν είναι αριθμητικά ευσταθής. Άρα πρέπει να αποφεύγονται οι μη ορθογώνιοι μετασχηματισμοί για τον υπολογισμό ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων και να χρησιμοποιούνται μόνο ορθογώνιοι ή ορθοκανονικοί μετασχηματισμοί. Πράγματι, αν ο πίνακας  $A$  μετασχηματιστεί σε πίνακα  $B$  μέσω ορθοκανονικών μετασχηματισμών ομοιότητας, τότε η διαταραχή του  $A$  θα έχει ως αποτέλεσμα διαταραχή του  $B$  ίσου μεγέθους. Δηλαδή, αν

$$B = U^*AU$$

και

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

τότε προκύπτει ότι

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

Μία κανονική μορφή που αποκαλύπτει τις ιδιοτιμές είναι η τριγωνική μορφή, όπου τα διαγώνια στοιχεία είναι οι ιδιοτιμές.

**Θεώρημα 3.7.1 (Τριγωνοποίηση Schur).** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ . Τότε υπάρχει ορθοκανονικός πίνακας  $U$  τέτοιος ώστε

$$U^*AU = T,$$

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

*Απόδειξη.* Η απόδειξη θα γίνει με επάγωγή στο  $n$ . Αν  $n = 1$  το θεώρημα ισχύει. Υποθέτουμε ότι ισχύει για  $n = k - 1$  και θα δείξουμε ότι ισχύει για  $n = k$ . Έστω  $u$  το κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα του  $A$  που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda_1$ . Ορίζουμε  $U_1 = (u, V)$ , όπου ο  $V$  είναι πίνακας  $k \times (k - 1)$  και ορθοκανονικός. Τότε ο  $U_1$  είναι ορθοκανονικός και  $A_1 = U_1^*AU_1 = \text{diag}(\lambda_1, \hat{A})$ , όπου ο  $\hat{A}$  είναι  $(k - 1) \times (k - 1)$ . Από την υπόθεση, υπάρχει ορθοκανονικός πίνακας  $V_1$  τάξης  $(k - 1)$ , τέτοιος ώστε ο  $\hat{T} = V_1^*(\hat{A})V_1$  να είναι τριγωνικός. Τότε, ορίζοντας  $U_2 = \text{diag}(1, V_1)$ , παρατηρούμε ότι ο  $U_2$  είναι ορθοκανονικός και

$$U_2^*A_1U_2 = U_2^*U_1^*AU_1U_2 = U^*AU.$$

Επιπλέον,  $U^*AU = \text{diag } V_1^*\hat{A}V_1 = \hat{T}$ . Αφού ο  $\hat{T}$  είναι τριγωνικός, τότε και ο  $U^*AU$  είναι τριγωνικός. Άρα οι ιδιοτιμές ενός τριγωνικού πίνακα είναι τα διαγώνια στοιχεία και έχουμε τελειώσει.  $\square$

Αφού ένας πραγματικός πίνακας μπορεί να έχει μιγαδικές ιδιοτιμές, οι παραπάνω πίνακες  $T$  και  $U$  μπορεί να είναι μιγαδικοί. Ωστόσο, μπορούμε να επιλέξουμε ο  $U$  να είναι πραγματικός ορθογώνιος πίνακας, αν ο  $T$  αντικατασταθεί με τον  $R$ , ο οποίος θα είναι σχεδόν τριγωνικός.

**Θεώρημα 3.7.2 (Real Schur τριγωνοποίηση).** Έστω πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Τότε υπάρχει  $n \times n$  ορθογώνιος πίνακας  $Q$  τέτοιος ώστε

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

όπου κάθε  $R_{ii}$  είναι είτε βαθμωτό είτε  $2 \times 2$  πίνακας. Τα βαθμωτά αντιστοιχούν στις πραγματικές ιδιοτιμές και οι  $2 \times 2$  πίνακες αντιστοιχούν στις μιγαδικές συζυγείς ιδιοτιμές.

**Παρατήρηση 3.7.3.** Ο πίνακας  $\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}$  με  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ , έχει ιδιοτιμές τις  $\alpha + \beta i$  και  $\alpha - \beta i$ .

*Απόδειξη.* Έστω  $\lambda = \alpha + \beta i$ , με  $\beta \neq 0$  ιδιοτιμή του  $A$  και  $x = u + iv$  το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα. Τότε η  $\bar{\lambda} = \alpha - \beta i$  είναι επίσης ιδιοτιμή του  $A$  με αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα το  $\bar{x} = u - iv$ . Πράγματι,

$$\begin{aligned} Ax &= A(u + iv) = Au + iAv, \\ \lambda x &= (\alpha + \beta i)(u + iv) = (\alpha u - \beta v) + i(\beta u + \alpha v). \end{aligned}$$

Άρα,

$$\begin{aligned} A\bar{x} &= A(u - iv) = Au - iAv \\ &= (\alpha u - \beta v) - i(\beta u + \alpha v) \\ &= (\alpha - i\beta)u - i(\alpha - i\beta)v \\ &= (\alpha - i\beta)(u - iv) \\ &= \bar{\lambda}\bar{x}. \end{aligned}$$

Σε αυτό το σημείο ξεκινάει ουσιαστικά η απόδειξη του θεωρήματος. Έστω λοιπόν ότι  $k$  είναι ο αριθμός των συζυγών μιγαδικών ζευγών ιδιοτιμών του πίνακα  $A$ . Θα αποδείξουμε το θεώρημα με επαγωγή στο  $k$ .

Έστω ότι  $k = 0$ . Σε αυτή την περίπτωση ο πίνακας  $A$  έχει πραγματικές ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα. Επαναλαμβάνουμε την απόδειξη της τριγωνοποίησης Schur για να λάβουμε την παραγοντοποίηση  $U^*AU = T$ , όπου  $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$  και  $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Έτσι, υπάρχουν  $n$  διαγώνια  $1 \times 1$  block  $R_{jj}$  στην παραγοντοποίηση  $Q^T A Q$ .

Έστω τώρα ότι το θεώρημα ισχύει για όλους τους πίνακες με λιγότερα από  $k$  ζεύγη συζυγών μιγαδικών ιδιοτιμών. Τότε, αν  $\lambda = \alpha + \beta i$  με  $\beta \neq 0$  και  $x = u + iv$ , όπως προηγουμένως, έχουμε

$$A(u, v) = (u, v) \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Έστω  $\{x_1, x_2\}$  μία ορθογώνια βάση του  $\text{span}(u, v)$ . Τότε αφού τα  $u$  και  $v$  είναι γραμμικά ανεξάρτητα, υπάρχει ένας μη ιδιάζων  $2 \times 2$  πραγματικός πίνακας  $C$  έτσι ώστε

$$(x_1, x_2) = (u, v) C.$$

Τώρα,

$$\begin{aligned} A(x_1, x_2) &= A(u, v) C = A(u, v) \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix} C \\ &= (x_1, x_2) C^{-1} \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix} C =: (x_1, x_2) S. \end{aligned}$$

Οι πίνακες  $S$  και  $\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}$  είναι όμοιοι, άρα έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές. Κατασκευάζουμε ορθογώνιο πίνακα  $(x_1, x_2, \dots, x_n) =: (x_1, x_2, W)$ . Τότε

$$[(x_1, x_2), W]^T A [(x_1, x_2), W] = \begin{pmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ W^T \end{pmatrix} [(x_1, x_2) S, AW] = \begin{pmatrix} S & (x_1, x_2)^T AW \\ 0 & W^T AW \end{pmatrix}.$$

Ο πίνακας  $W^T AW$  έχει λιγότερα από  $k$  ζεύγη συζυγών μιγαδικών ιδιοτιμών. Έτσι, από την επαγωγική υπόθεση υπάρχει ορθογώνιος πίνακας  $Q_2 \in \mathbb{R}^{(n-2) \times (n-2)}$ , έτσι ώστε ο πίνακας

$$Q_2^T (W^T AW) Q_2$$

να είναι σχεδόν άνω τριγωνικός. Άρα, ο ορθογώνιος πίνακας

$$Q = (x_1, x_2, \dots, x_n) \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & Q_2 \end{pmatrix}$$

μετασχηματίζει τον  $A$  σε σχεδόν άνω τριγωνική μορφή. □

**Ορισμός 3.7.4.** Ο πίνακας  $R$  ονομάζεται **real Schur form** του  $A$ .

### 3.7α' Βασική QR iteration

Η ιδέα της QR iteration είναι να κατασκευάσουμε ακολουθία πινάκων  $\{A_k\}$ , ξεκινώντας από έναν αρχικό  $A_0 = A$ , έτσι ώστε ο κάθε πίνακας  $A_{i+1}$  να είναι ορθογώνιος όμοιος με τον  $A_i$ , με την προσδοκία ότι η ακολουθία θα συγκλίνει στη real Schur form του  $A$ .

#### Αλγόριθμος 3.7.5. Basic QR Iteration

ΕΙΣΟΔΟΣ

$n \times n$  πίνακας  $A$ .

ΕΞΟΔΟΣ

Η ακολουθία πινάκων  $\{A_k\}$  που περιέχει τις ιδιοτιμές του  $A$ .

1. Αρχικοποίηση  $A_0 = A$ .

2. Υπολογισμός ακολουθίας πινάκων  $(A_k)$ :

**for**  $k = 1, 2, \dots$ , **do**

2.1 Εύρεση της QR παραγοντοποίησης του  $A_{k-1}$ :

$A_{k-1} = Q_{k-1} R_{k-1}$  (QR παραγοντοποίηση).

2.2 Υπολογισμός του  $A_k = R_{k-1} Q_{k-1}$  (αντίστροφος πολλαπλασιασμός).

**end for**

**Ιδιότητα της ακολουθίας  $\{A_k\}$** 

Οι πίνακες  $\{A_k\}$  έχουν μία πολύ ενδιαφέρουσα ιδιότητα. Κάθε πίνακας είναι ορθογώνια όμοιος με τον προηγούμενο και συνεπώς με τον αρχικό πίνακα. Για παράδειγμα,

$$\begin{aligned} A_1 &= R_0 Q_0 = Q_0^T A_0 Q_0 \\ A_2 &= R_1 Q_1 = Q_1^T A_1 Q_1. \end{aligned}$$

Άρα ο πίνακας  $A_1$  είναι ορθογώνια όμοιος με τον  $A$  και ο πίνακας  $A_2$  είναι ορθογώνια όμοιος με τον  $A_1$ . Έτσι, ο  $A_2$  είναι ορθογώνια όμοιος με τον  $A$ . Πράγματι,

$$A_2 = Q_1^T A_1 Q_1 = Q_1^T (Q_0^T A_0 Q_0) Q_1 = (Q_0 Q_1)^T A_0 (Q_0 Q_1) = (Q_0 Q_1)^T A (Q_0 Q_1).$$

Άρα, αφού κάθε πίνακας είναι ορθογώνια όμοιος με τον αρχικό, θα έχει και τις ίδιες ιδιοτιμές. Έτσι, αν η ακολουθία  $\{A_k\}$  συγκλίνει σε έναν τριγωνικό ή σχεδόν τριγωνικό πίνακα, έχουμε τις ιδιοτιμές που ζητάμε.

**Συνθήκη για σύγκλιση της μεθόδου**

**Θεώρημα 3.7.6 (Σύγκλιση της QR iteration).** Έστω οι ιδιοτιμές  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ , για τις οποίες ισχύει  $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$ . Έστω, επίσης, ότι ο  $X$  είναι ο πίνακας των αριστερών ιδιοδιανυσμάτων, του οποίου τα κυρίαρχα στοιχεία είναι μη μηδενικά. Τότε η ακολουθία  $\{A_k\}$  συγκλίνει σε έναν άνω τριγωνικό πίνακα ή στη real Schur form του  $A$ .

**3.7β' Hessenberg QR iteration**

Η μέθοδος QR iteration δεν είναι αποτελεσματική όταν ο πίνακας  $A$  είναι γεμάτος με μη μηδενικά στοιχεία. Η QR παραγοντοποίηση του απαιτεί  $O(n^3)$  flops και άρα  $n$  QR iterations απαιτούν  $O(n^4)$  flops, καθιστώντας τη μέθοδο μη υλοποιήσιμη. Αυτό που μπορεί να γίνει είναι να ανάγουμε τον πίνακα  $A$  σε έναν πίνακα Hessenberg με ορθογώνιους μετασχηματισμούς ομοιότητας πριν εφαρμόσουμε την QR iteration. Μάλιστα, η δομή του πίνακα Hessenberg θα διατηρηθεί.

**Θεώρημα 3.7.7.** Έστω  $A_k$  ένας μη ανηγμένος άνω Hessenberg πίνακας και έστω  $A_k = Q_k R_k$  η QR παραγοντοποίηση του  $A_k$ . Τότε ο πίνακας  $A_{k+1} = R_k Q_k$  είναι επίσης άνω Hessenberg.

*Απόδειξη.* Υποθέτουμε ότι χρησιμοποιούμε μετασχηματισμό Givens για να παραγοντοποιήσουμε τον πίνακα  $A_k$  σε  $Q_k R_k$ . Τότε ο πίνακας

$$Q_k = J(2, 1, \vartheta) J(3, 2, \vartheta) \cdots J(n, n-1, \vartheta)$$

είναι επίσης άνω Hessenberg. Αφού ο πίνακας  $R_k$  είναι άνω τριγωνικός και ο  $Q_k$  είναι άνω Hessenberg, τότε ο πίνακας  $A_{k+1} = R_k Q_k$  είναι και αυτός άνω Hessenberg.  $\square$

### 3.7γ' Single-shift QR iteration

Αν και η αρχική αναγωγή σε πίνακα Hessenberg κάνει τη μέθοδο της QR iteration να είναι της τάξης του  $O(n^3)$ , η ταχύτητα της σύγκλισης μπορεί να είναι αργή αν μια ιδιοτιμή  $\lambda_i$  είναι κοντά στην προηγούμενη ιδιοτιμή  $\lambda_{i-1}$ . Αυτό συμβαίνει γιατί η ταχύτητα καθορίζεται από το πηλίκο

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

Ευτυχώς, η ταχύτητα μπορεί να βελτιωθεί αρκετά χρησιμοποιώντας ένα shift  $\hat{\lambda}_i$ , το οποίο είναι κοντά σε τιμή στην ιδιοτιμή  $\lambda_i$ . Παρατηρείται ότι, αν εφαρμόσουμε QR iteration σε έναν shifted πίνακα  $\hat{H} = H - \hat{\lambda}I$ , όπου  $\hat{\lambda}$  είναι ένα κατάλληλο shift, παρά στον αρχικό πίνακα  $H$ , τότε η ταχύτητα της σύγκλισης θα είναι πιο γρήγορη. Βέβαια, μόλις βρούμε μια ιδιοτιμή του  $\hat{H}$ , η αντίστοιχη ιδιοτιμή του  $H$  μπορεί εύκολα να βρεθεί απλά προσθέτοντας το shift. Σε κάθε επανάληψη, το στοιχείο  $(n, n)$  του εκάστοτε πίνακα μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν shift. Η διαδικασία αυτή είναι γνωστή ως single-shift Hessenberg QR iteration και είναι χρήσιμη αν ζητείται μία προσέγγιση πραγματικής ιδιοτιμής. Στην περίπτωση που θέλουμε να υπολογίσουμε τις συζυγείς μιγαδικές ιδιοτιμές, τροποποιούμε τη μέθοδο σε double-shift QR iteration.

### 3.7δ' Double-shift QR iteration

#### Ένα iteration step της double-shift QR iteration (complex αριθμητική)

Έστω το ζευγάρι  $k_1$  και  $k_2 = \bar{k}_1$  των συζυγών μιγαδικών ιδιοτιμών του  $2 \times 2$  κάτω δεξιά υποπίνακα του αρχικού πίνακα Hessenberg  $H_0$ . Τότε, το πρώτο βήμα της επανάληψης είναι το εξής:

$$\begin{aligned} H_0 - k_1 I &= Q_0 R_0, & H_1 &= R_0 Q_0 + k_1 I, \\ H_1 - k_2 I &= Q_1 R_1, & H_2 &= R_1 Q_1 + k_2 I. \end{aligned}$$

#### Αποφυγή της complex αριθμητικής στην double-shift QR iteration

Αφού  $k_1$  και  $k_2$  είναι μιγαδικοί, ο αλγόριθμος double-shift QR iteration θα απαιτεί complex αριθμητική, ακόμα και όταν ο αρχικός πίνακας  $H_0$  είναι πραγματικός. Ωστόσο, με έναν επιδέξιο χειρισμό μπορούμε να αποφύγουμε την complex αριθμητική. Θα δείξουμε ότι ο πίνακας  $H_2$  είναι ορθογώνιος όμοιος με τον  $H_0$  μέσω πραγματικών μετασχηματισμών ομοιότητας και μπορεί απευθείας να υπολογιστεί, χωρίς τον επιπλέον υπολογισμό του  $H_1$ .



**Βήμα 1.** Ο  $H_2$  είναι ορθογώνια όμοιος με τον  $H_0$ . Πράγματι,

$$\begin{aligned}
 H_2 &= R_1 Q_1 + k_2 I \\
 &= Q_1^* (H_1 - k_2 I) Q_1 + k_2 I \\
 &= Q_1^* [R_0 Q_0 + (k_1 - k_2) I] Q_1 + k_2 I \\
 &= Q_1^* [Q_0^* (H_0 - k_1 I) Q_0 + (k_1 - k_2) I] Q_1 + k_2 I \\
 &= Q_1^* Q_0^* H_0 Q_0 Q_1.
 \end{aligned}$$

**Βήμα 2.** Ο πίνακας  $Q_0 Q_1$  του βήματος 1 είναι πραγματικός. Ορίζουμε τον πίνακα

$$N = (H_0 - k_2 I) (H_0 - k_1 I)$$

και δείχνουμε ότι (i) ο πίνακας  $N$  είναι πραγματικός και ότι (ii) ο πίνακας  $Q_0 Q_1$  είναι ο πίνακας  $Q$  της QR παραγοντοποίησης του  $N$ . Πράγματι,

$$(i) \quad N = (H_0 - k_2 I) (H_0 - k_1 I) = H_0^2 - (k_1 + k_2) H_0 + k_1 k_2 I = H_0^2 - t H_0 + d I, \text{ όπου } t = k_1 + k_2 \text{ και } d = k_1 k_2. \text{ Άρα ο } N \text{ είναι πραγματικός πίνακας.}$$

$$(ii) \quad N = (H_0 - k_2 I) (H_0 - k_1 I) = (H_0 - k_2 I) Q_0 R_0 = Q_0 Q_0^* (H_0 - k_2 I) Q_0 R_0 = Q_0 (H_1 - k_2 I) R_0 = Q_0 Q_1 R_1 R_0. \text{ Άρα ο πίνακας } Q_0 Q_1 R_1 R_0 \text{ είναι η QR παραγοντοποίηση του } N \text{ και ο πίνακας } Q_0 Q_1 \text{ είναι ο πίνακας } Q. \text{ Αφού ο } N \text{ είναι πραγματικός, τότε και ο } Q_0 Q_1 \text{ είναι πραγματικός.}$$

Έτσι, ο  $H_0$  είναι όμοιος με τον  $H_2$  μέσω πραγματικών ορθογώνιων μετασχηματισμών ομοιότητας.

**Ένα iteration step της explicit double-shift QR iteration (real αριθμητική)**

1. Υπολογισμός του πραγματικού πίνακα  $N = H_0^2 - t H_0 + d I$ .
2. Εύρεση της QR παραγοντοποίησης του  $N$ :  $N = QR$ .
3. Υπολογισμός του πίνακα  $H_2 = Q^T H_0 Q$ .

### 3.7ε' Implicit QR iteration

Η μέθοδος της explicit double-shift QR iteration δεν είναι υλοποιήσιμη, καθώς μόνο ο υπολογισμός του πίνακα  $N$  απαιτεί  $O(n^3)$  flops. Ευτυχώς, με μία μικρή διαφοροποίηση, μπορούμε να μειώσουμε την πολυπλοκότητα σε  $O(n^2)$ .

**Ένα iteration step της implicit double-shift QR iteration**

1. Υπολογισμός της πρώτης στήλης  $n_1$  του πίνακα  $N$ .
2. Εύρεση πίνακα Householder  $P_0$  που να είναι τέτοιος ώστε το  $P_0 n_1$  να είναι πολλαπλάσιο του  $e_1$ .
3. Υπολογισμός του  $H'_0 = P_0^T H_0 P_0$ .
4. Υπολογισμός των Householder πινάκων  $P_1$  έως  $P_{n-2}$  που είναι τέτοιοι ώστε  $Z = P_0 P_1 \cdots P_{n-2}$ . Τότε ο  $H'_2 = Z^T H'_0 Z$  είναι άνω Hessenberg και η πρώτη στήλη του  $Q$  και του  $Z$  είναι ίδια.

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα implicit Q, μπορούμε να δείξουμε ότι οι πίνακες  $H_2$  και  $H'_2$  είναι μη ανηγμένοι άνω Hessenberg και είναι ουσιαστικά ο ίδιος πίνακας. Μένει να δείξουμε ότι (i) η διαδικασία αυτή απαιτεί  $O(n^2)$  flops και ότι (ii) οι πίνακες  $Z$  και  $Q$  έχουν την ίδια πρώτη στήλη.

**Ανάλυση των  $O(n^2)$  flops του implicit double-shift QR iteration step**

1. Τα στοιχεία του διανύσματος  $n_1$  μπορούν να γραφούν ως εξής:

$$n_1 = \begin{pmatrix} h_{11}^2 + h_{12}h_{21} - th_{11} + d \\ h_{21}(h_{11} + h_{22} - t) \\ h_{21}h_{32} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

2. Αφού το  $n_1$  έχει σχεδόν τρία μη μηδενικά στοιχεία, ο  $P_0$  έχει τη μορφή  $P_0 = \text{diag}(\hat{P}_0, I_{n-3})$ , όπου  $\hat{P}_0$  είναι ένας  $3 \times 3$  πίνακας Householder. Έτσι, ο υπολογισμός του  $P_0$  απαιτεί  $O(1)$  flops.
3. Εξαιτίας της δομής του  $P_0$  και του γεγονότος ότι ο πίνακας  $H_0$  είναι Hessenberg, ο πίνακας  $P_0^T H_0 P_0$  δεν είναι γεμάτος πίνακας. Είναι ένας Hessenberg πίνακας με ένα bulge.

Μία αναπαράσταση για  $n = 6$  είναι η εξής:

$$H'_0 = P_0^T H_0 P_0 = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ + & * & * & * & * & * \\ + & + & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}.$$

**Bulge-chase**

Ένα bulge θα δημιουργείται σε κάθε βήμα της αναγωγής του  $H_0$  σε πίνακα Hessenberg. Για αυτόν το λόγο, κατασκευάζουμε τους Householder πίνακες  $P_1$  έως  $P_{n-2}$ .

1. Δημιουργία του  $P_1$ :

$$P_1^T H'_0 P_1 = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & + & * & * & * & * \\ 0 & + & + & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}.$$

2. Δημιουργία του  $P_2$ :

$$P_2^T (P_1^T H'_0 P_1) P_2 = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & + & * & * & * \\ 0 & 0 & + & + & * & * \end{pmatrix}.$$

3. Δημιουργία του  $P_3$ :

$$P_3^T (P_2^T P_1^T H'_0 P_1 P_2) P_3 = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & + & * & * \end{pmatrix}.$$

4. Δημιουργία του  $P_4$ :

$$P_4 (P_3^T P_2^T P_1^T H'_0 P_1 P_2 P_3) P_4 = Z^T H'_0 Z = H'_2 = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}.$$

Στη γενική περίπτωση, πρέπει να δημιουργηθούν οι  $n - 2$  το πλήθος πίνακες Householder  $P_1, \dots, P_{n-2}$  και κάθε  $P_k$ ,  $k = 1, \dots, n - 3$ , έχει τη μορφή

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

όπου ο  $\hat{P}_k$  είναι  $3 \times 3$  πίνακας Householder. Ο τελευταίος πίνακας Householder  $P_{n-2}$  έχει τη μορφή

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

Λαμβάνοντας υπόψη όλα τα παραπάνω, καταλαβαίνουμε ότι η διαδικασία απαιτεί  $O(n^2)$  flops.

Τώρα, θα δείξουμε ότι οι πίνακες  $Q$  και  $Z$  έχουν την ίδια πρώτη στήλη. Πράγματι, ισχύει ότι  $P_k e_1 = e_1$  για  $k = 1, \dots, n-2$  και ότι οι  $P_0$  και  $Q$  έχουν την ίδια πρώτη στήλη. Άρα  $Ze_1 = P_0 P_1 \cdots P_{n-2} e_1 = P_0 e_1 = Qe_1$ .

### Αλγόριθμος 3.7.8. Ένα Iteration Step της Implicit Double-Shift QR Iteration

#### ΕΙΣΟΔΟΣ

Μη ανηγμένος άνω Hessenberg πίνακας  $H$ .

#### ΕΞΟΔΟΣ

Ο μη ανηγμένος άνω Hessenberg πίνακας  $Q^T H Q$ , όπου ο  $Q = P_0 P_1 \cdots P_{n-2}$  είναι γινόμενο πινάκων Householder.

#### ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ

Πάνω στον πίνακα  $H$ .

1. Υπολογισμός των αριθμών  $t$  και  $d$  ως εξής:

$$t = h_{n-1,n-1} + h_{nn}, \quad d = h_{n-1,n-1}h_{nn} - h_{n,n-1}h_{n-1,n}.$$

2. Υπολογισμός των τριών πρώτων μη μηδενικών στοιχείων της πρώτης στήλης του πίνακα  $N = H^2 - tH + dI$ :

$$x \equiv n_{11} = h_{11}^2 - th_{11} + d + h_{12}h_{21},$$

$$y \equiv n_{21} = h_{21}(h_{11} + h_{22} - t),$$

$$z \equiv n_{31} = h_{21}h_{32}.$$

3. Υπολογισμός των πινάκων Householder  $P_0 P_1 \cdots P_{n-2}$ , που είναι τέτοιοι ώστε ο τελικός πίνακας να είναι άνω Hessenberg:

#### 3.1 **for** $k = 0, 1, 2, \dots, n-3$ **do**

3.1.1 Εύρεση του  $3 \times 3$  Householder πίνακα  $\hat{P}_k$ , που είναι τέτοιος ώστε

$$\hat{P}_k \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

3.1.2 Υπολογισμός του  $P_k^T H P_k$ , όπου  $P_k = \text{diag}(I_k, \hat{P}_k, I_{n-k-3})$  και αποθήκευσή του πάνω στον  $H$ , δηλαδή  $H \equiv P_k^T H P_k$ .

3.1.3 Ενημέρωση των εισόδων  $x, y$  και  $z$ :

$x \equiv h_{k+2,k+1}$ ,  $y \equiv h_{k+3,k+1}$  και (αν  $k < n-3$ )  $z \equiv h_{k+4,k+1}$ .

**end for**

3.2 Εύρεση του πίνακα Householder  $\hat{P}_{n-2}$  τάξης 2, ο οποίος είναι τέτοιος ώστε

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

3.3 Υπολογισμός του  $P_{n-2}^T H P_{n-2}$ , όπου  $P_{n-2} = \text{diag}(I_{n-2}, \hat{P}_{n-2})$  και αποθήκευσή του πάνω στον  $H$ , δηλαδή  $H \equiv P_{n-2}^T H P_{n-2}$ .

#### Πολυπλοκότητα

$10n^2$  flops. Αν ο πίνακας  $Q$  πρέπει να υπολογιστεί, τότε απαιτούνται επιπλέον  $10n^2$  flops.

### 3.7ε' Εξασφάλιση της real Schur form του $A$

1. Μετασχηματισμός του πίνακα  $A$  σε άνω Hessenberg πίνακα  $H$ .
2. Εφαρμογή της implicit double-shift QR iteration method στον πίνακα  $H$ .

Τυπικά, μετά από δύο με τρία βήματα του αλγορίθμου, ένα ή δύο στοιχεία κάτω από τη διαγώνιο στο κάτω δεξιά κομμάτι του πίνακα Hessenberg συγκλίνουν στο μηδέν. Αυτό θα μας δώσει την πραγματική ή το ζευγάρι των συζυγών μιγαδικών ιδιοτιμών του πίνακα. Αφού έχουμε υπολογίσει την πραγματική ή το ζευγάρι συζυγών μιγαδικών ιδιοτιμών, μπορούμε να διαγράψουμε την τελευταία σειρά και στήλη ή τις τελευταίες δύο σειρές και στήλες αντίστοιχα, και να συνεχίσουμε τη διαδικασία στον υποπίνακα. Η διαδικασία αυτή είναι γνωστή ως deflation. Οι ιδιοτιμές του deflated υποπίνακα είναι και ιδιοτιμές του αρχικού πίνακα. Πράγματι, έστω ότι πριν το deflation ο πίνακας είχε τη μορφή

$$H_k = \begin{pmatrix} A' & C' \\ 0 & B' \end{pmatrix},$$

όπου  $B'$  είναι ο  $1 \times 1$  ή ο  $2 \times 2$  υποπίνακας. Τότε η χαρακτηριστική εξίσωση του  $H_k$  είναι

$$\det(\lambda I - H_k) = \det(\lambda I - A') \det(\lambda I - B').$$

Άρα οι ιδιοτιμές του  $H_k$  είναι οι ιδιοτιμές του  $A'$  μαζί με αυτές του  $B'$ . Αφού ο  $H_k$  είναι ορθογώνιος όμοιος με τον αρχικό πίνακα  $A$  και άρα οι ιδιοτιμές του είναι και ιδιοτιμές του  $A$ , συμπεραίνουμε ότι οι ιδιοτιμές του  $B'$  είναι και ιδιοτιμές του  $A$ .

**Πολυπλοκότητα**

Χρειάζονται περίπου 2 βήματα του αλγορίθμου για να υπολογιστεί η κάθε ιδιοτιμή, άρα περίπου  $10n^3$  flops για όλες τις ιδιοτιμές. Αν επιπλέον χρειαζόμαστε τον πίνακα  $Q$  και τον τελικό πίνακα της real Schur form  $T$ , το κόστος είναι  $25n^3$  flops.

**Παράδειγμα 3.7.9.** Έστω ο πίνακας

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

Θέλουμε να υπολογίσουμε τη real Schur form του  $H$ .

1. Υπολογίζουμε τα  $t$  και  $d$ :

$$\begin{aligned} t &= h_{22} + h_{33} = 0 + 2 = 2, \\ d &= h_{22}h_{33} - h_{32}h_{23} = 0 \cdot 2 - (-2) \cdot 1 = 0 + 2 = 2. \end{aligned}$$

2. Υπολογίζουμε τα τρία πρώτα μη μηδενικά στοιχεία της πρώτης στήλης του πίνακα  $N = H^2 - tH + dI$ :

$$\begin{aligned} x &= n_{11} = h_{11}^2 - th_{11} + d + h_{12}h_{21} = 1^2 - 2 \cdot 1 + 2 + 2 \cdot 1 = 1 - 2 + 2 + 2 = 3, \\ y &= n_{21} = h_{21}(h_{11} + h_{22} - t) = 1 \cdot (1 + 0 - 2) = -1, \\ z &= n_{31} = h_{21}h_{32} = 1 \cdot (-2) = -2. \end{aligned}$$

3.  $k = 0$ :

$$\begin{aligned} P_0 &= I - \frac{2uu^T}{u^T u}, \quad \text{όπου} \quad u = \begin{pmatrix} 6.7414 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}, \\ P_0 &= \begin{pmatrix} -0.8018 & 0.2673 & 0.5345 \\ 0.2673 & 0.9604 & -0.0793 \\ 0.5345 & -0.0793 & 0.8414 \end{pmatrix}, \\ H &\equiv P_0^T H P_0 = \begin{pmatrix} -0.8571 & -2.6248 & -0.9733 \\ 0.0581 & 0.8666 & 1.9505 \\ 1.1852 & -0.7221 & 2.9906 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Ενημερώνουμε τα  $x$  και  $y$ :

$$\begin{aligned} x &= h_{21} = 0.0581, \\ y &= h_{31} = 1.1852. \end{aligned}$$

Βρίσκουμε τον  $P_1$ :

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

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0490 & -0.9988 \\ 0 & -0.9988 & 0.0490 \end{pmatrix},$$

$$H \equiv P_1^T H P_1 = \begin{pmatrix} -0.8571 & 1.1007 & 2.5740 \\ -1.1867 & 3.0455 & -0.8289 \\ 0 & 1.8437 & 0.8116 \end{pmatrix}.$$

Αυτό ήταν ένα iteration step της implicit double-shift QR iteration. Έτσι, επαναλαμβάνοντας τη διαδικασία, προκύπτει ότι

| iteration | $h_{21}$ |
|-----------|----------|
| 1         | -1.1867  |
| 2         | 0.3543   |
| 3         | 0.0129   |
| 4         | 0        |

Άρα η real Schur form του  $H$  είναι

$$\begin{pmatrix} -\mathbf{1.1663} & -1.3326 & -2.0531 \\ 0 & \boxed{1.2384 \quad 1.6659} \\ 0 & \boxed{-1.9409 \quad 2.9279} \end{pmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές του  $2 \times 2$  κάτω δεξιά υποπίνακα είναι  $2.0832 \pm 1.5874i$ . Άρα οι ιδιοτιμές του πίνακα  $H$  είναι  $-1.1663$  και  $2.0832 \pm 1.5874i$ .

### 3.8 Υπολογισμός ιδιοδιανυσμάτων

Μόλις έχουμε υπολογίσει μία ιδιοτιμή  $\lambda$  του  $H$  με την QR iteration, χρησιμοποιούμε την inverse iteration για το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα, εκμεταλλευόμενοι τη Hessenberg μορφή του πίνακα. Πράγματι, έστω  $y$  ένα ιδιοδιάνυσμα του  $H$  και έστω  $P^T A P = H$ . Τότε  $H y = \lambda y$  ή  $P^T A P y = \lambda y$ , άρα  $A P y = \lambda P y$ . Καταλήγουμε στο ότι το  $x = P y$  είναι ιδιοδιάνυσμα του  $A$ .

**Αλγόριθμος 3.8.1. Hessenberg-Inverse Iteration**ΕΙΣΟΔΟΣ

(i)  $n \times n$  πίνακας  $A$ . (ii) Ακέραιος  $N$ , μέγιστος αριθμός επαναλήψεων. (iii) Ανοχή σφάλματος  $\epsilon$ . (iv) Μία αρχική προσέγγιση του ιδιοδιανύσματος  $y^{(0)}$  του μετασχηματισμένου πίνακα Hessenberg  $H$ .

ΕΞΟΔΟΣ

Μία προσέγγιση  $x$  του ιδιοδιανύσματος του πίνακα  $A$ .

1. Αναγωγή του πίνακα  $A$  στον άνω Hessenberg πίνακα  $H$ :  $P^T A P = H$ .
2. Υπολογισμός της ιδιοτιμής  $\lambda$ , της οποίας το ιδιοδιάνυσμα  $x$  αναζητείται, χρησιμοποιώντας την implicit double-shift QR iteration.
3. Εφαρμογή της inverse iteration:
 

**for**  $k = 1, 2, \dots$  **do**
  - 3.1 Επίλυση του συστήματος Hessenberg  $(H - \lambda I)z^{(k)} = y^{(k-1)}$ .
  - 3.2 Κανονικοποίηση του  $y^{(k)} = \frac{z^{(k)}}{\max(z^{(k)})}$ .
  - 3.3 Διακοπή της διαδικασίας αν  $\|Hy^{(k)} - \lambda y^{(k)}\| < \epsilon$  ή αν  $k > N$ .**end for**
4. Εύρεση του ιδιοδιανύσματος  $x = Py^{(k)}$ .

**3.9 Krylov subspace methods**

Εξαιτίας του υπολογιστικού κόστους, είναι μη ρεαλιστικό να βρούμε όλο το φάσμα ενός πίνακα χρησιμοποιώντας μία Krylov subspace μέθοδο. Θα ήμασταν τυχεροί αν καταφέραμε να βρούμε έστω και μερικές καλές προσεγγίσεις ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων με αυτόν τον τρόπο.

**3.9α' Explicit restarted Arnoldi method**

Αν ο αλγόριθμος Arnoldi method υλοποιηθεί για  $m = n$  βήματα θα εξασφαλίσουμε τον  $n \times n$  Hessenberg πίνακα  $H_n$  για τον οποίο ισχύει ότι

$$V_n^T A V_n = H_n,$$

όπου ο πίνακας  $V_n$  είναι ορθογώνιος. Σε αυτήν την περίπτωση, οι ιδιοτιμές του  $A$  είναι και οι ιδιοτιμές του  $H_n$ . Δηλαδή, αν ο αλγόριθμος αυτός κάνει  $n$  το πλήθος επαναλήψεων, θα βρούμε όλες τις ιδιοτιμές του πίνακα  $A$  βρίσκοντας τις ιδιοτιμές του



$H_n$ . Ωστόσο, αυτό δεν είναι πρακτικό για μεγάλο  $n$ . Η ερώτηση που προκύπτει είναι η εξής: όταν  $m < n$ , πόσο καλά προσεγγίζουν οι ιδιοτιμές του  $H_m$  τις ιδιοτιμές του  $A$ ; Ο αλγόριθμος σταματάει στο βήμα  $k$  όταν  $\|\hat{v}\|_2 = 0$ .

Μπορεί να αποδειχθεί ότι αυτό συμβαίνει αν και μόνο αν το αρχικό διάνυσμα  $v_1$  είναι συνδυασμός των ιδιοδιανυσμάτων. Τότε ο υπόχωρος Krylov  $\mathcal{K}_k$  είναι ένας αναλλοίωτος υπόχωρος του  $A$  και το breakdown του αλγορίθμου είναι ευχάριστο.

**Ορισμός 3.9.1.** Μία ιδιοτιμή  $\lambda_i^{(m)}$  του  $H_m$  ονομάζεται **τιμή Ritz** και το διάνυσμα  $u_i^{(m)} = V_m y_i^{(m)}$ , όπου  $y_i^{(m)}$  είναι το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda_i^{(m)}$ , ονομάζεται **ιδιοδιάνυσμα Ritz**. Το ζεύγος  $(\lambda_i^{(m)}, u_i^{(m)})$  ονομάζεται **ζεύγος Ritz**.

Κάποιες τιμές Ritz τυπικά αποτελούν καλές προσεγγίσεις των ιδιοτιμών  $\lambda_i$  του  $A$ . Στην πραγματικότητα όμως, χρειάζεται να υπολογίσουμε μόνο ένα ζεύγος ιδιοτιμής και ιδιοδιανύσματος και μετά, χρησιμοποιώντας την τεχνική deflation, θα υπολογίσουμε τα υπόλοιπα ζευγάρια. Για να πάρουμε μια καλή προσέγγιση ενός ζεύγους, η μέθοδος Arnoldi μπορεί να εφαρμοστεί άμεσα ξεκινώντας με ένα σταθεροποιημένο  $m$ .

### Residual norm

Έστω το ζεύγος Ritz  $(\lambda_i^{(m)}, u_i^{(m)})$ . Τότε ισχύει ότι

$$\|r_i^{(m)}\|_2 = \|(A - \lambda_i^{(m)}I)u_i^{(m)}\|_2 = h_{m+1,m} |e_m^* y_i^{(m)}|,$$

όπου  $e_m$  είναι το μοναδιαίο διάνυσμα. Παρόλο που η νόρμα αυτή δεν ενδείκνυται για να επιβεβαιώσει μία καλή προσέγγιση, μπορεί να χρησιμοποιηθεί σαν κριτήριο τερματισμού του αλγορίθμου.

### Αλγόριθμος 3.9.2. Explicit Restarted Arnoldi Method

1. Υλοποίηση  $m$  βημάτων του αλγορίθμου Arnoldi method.
2. Υπολογισμός της δεξιότερης ιδιοτιμής  $\lambda_1^{(m)}$  και του αντίστοιχου ιδιοδιανύσματος Ritz  $u_1^{(m)} = V_m y_1^{(m)}$ .
3. Αν η residual norm  $h_{m+1,m} |e_m^* y_i^{(m)}|$  είναι μικρή, τερματισμός. Αλλιώς, επανάληψη του βήματος 1 με  $v_1 \equiv u_1^{(m)}$ .

### Deflation

Ο παραπάνω αλγόριθμος προσεγγίζει το δεξιότερο ζεύγος ιδιοτιμής και ιδιοδιανύσματος  $(\lambda_1, u_1)$  του πίνακα  $A$ . Αν χρειαζόμαστε περισσότερα ζεύγη θα χρησιμοποιήσουμε την τεχνική deflation, η οποία λειτουργεί ως εξής:

Έστω ότι έχουμε υπολογίσει μία ορθογώνια βάση  $\{u_1, u_2, \dots, u_{k-1}\}$  του αναλλοίωτου υποχώρου που αντιστοιχεί στις ιδιοτιμές  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{k-1}$ . Θέτουμε

$$U_{k-1} = (u_1, u_2, \dots, u_{k-1}).$$

Τότε, για να υπολογίσουμε την ιδιοτιμή  $\lambda_k$ , σχηματίζουμε τον πίνακα

$$\tilde{A} = A - U_{k-1}\Sigma U_{k-1}^*,$$

όπου  $\Sigma = \text{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{k-1})$  είναι ο πίνακας των shifts. Τότε οι ιδιοτιμές του  $\tilde{A}$  είναι οι

$$\{\lambda_1 - \alpha_1, \lambda_2 - \alpha_2, \dots, \lambda_{k-1} - \alpha_{k-1}\} \cup \{\lambda_k, \dots, \lambda_n\}.$$

### 3.9β' Implicit restarted Arnoldi method

Η μέθοδος αυτή είναι χρήσιμη για να εξάγουμε χρήσιμες πληροφορίες από το  $m$  βήμα της μεθόδου Krylov, αποφεύγοντας το υπολογιστικό κόστος και χρησιμοποιώντας την τεχνική της QR iteration. Έστω  $m = k + p$ . Έστω  $V_k = (v_1, v_2, \dots, v_k)$ . Η διαδικασία είναι η εξής:

1. Υλοποιούμε  $m$  βήματα της Arnoldi method για να βρούμε τους πίνακες  $V_m$  και  $H_m$  και άρα την παραγοντοποίηση Arnoldi

$$AV_m = V_m H_m + f_m e_m^T.$$

2. Συμπιέζουμε την παραγοντοποίηση σε μία μήκους  $k$  (περιέχονται οι πληροφορίες που χρειαζόμαστε) εφαρμόζοντας την QR iteration με  $p$  shifts, έστω  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_p$ , δηλαδή

$$AV_m^+ = V_m^+ H_m^+ + f_m e_m^T Q,$$

όπου  $V_m^+ = V_m Q$ ,  $H_m^+ = Q^* H_m Q$  και  $Q = Q_1 Q_2 \dots Q_p$ . Κάθε  $Q_j$  είναι ο ορθογώνιος πίνακας που σχετίζεται με το shift  $\mu_j$  που χρησιμοποιήθηκε στον αλγόριθμο shifted QR iteration.

3. Εξισώνουμε τις  $k$  πρώτες στήλες στα δύο μέλη της προηγούμενης εξίσωσης, υπολογίζουμε τους πίνακες  $V_k^+$  και  $H_k^+$ , έτσι ώστε να έχουμε μία καινούρια Arnoldi παραγοντοποίηση  $k$  βημάτων

$$AV_k^+ = V_k^+ H_k^+ + f_k^+ e_k^T.$$

4. Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω, εφαρμόζουμε  $p$  επιπρόσθετα βήματα της παραγοντοποίησης Arnoldi για να δημιουργήσουμε την καινούρια παραγοντοποίηση Arnoldi  $m$  βημάτων

$$AV_m = V_m H_m + f_m e_m^T.$$

### Αλγόριθμος 3.9.3. Implicit Restarted Arnoldi Method

#### ΕΙΣΟΔΟΣ

- (i) Μεγάλος και αραιός πίνακας  $A$ . (ii) Αρχικό διάνυσμα  $v_1$  μοναδιαίου μήκους.  
(iii) Θετικοί ακέραιοι  $k$ ,  $p$  και  $m$  έτσι ώστε  $m = k + p$ .

#### ΕΞΟΔΟΣ

Οι  $k$  προσεγγίσεις ιδιοτιμών του πίνακα  $A$ .

1. Υλοποίηση  $m$  επαναλήψεων του αλγορίθμου Arnoldi method ώστε να βρεθεί η Arnoldi παραγοντοποίηση:  $AV_m = V_m H_m + f_m e_m^T$ .
2. Υλοποίηση των παρακάτω βημάτων μέχρις ότου να επιτευχθεί σύγκλιση:
  - 2.1 Υπολογισμός του φάσματος του πίνακα  $H_m$  και επιλογή των  $p$  shifts  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_p$ .
  - 2.2 Αρχικοποίηση  $Q = I_m$ .
  - 2.3 **for**  $j = 1, 2, \dots, p$  **do**  
 QR παραγοντοποίηση:  $H_m - \mu_j I = Q_j R_j$ .  
 Ενημέρωση:  $H_m = Q_j^* H_m Q_j$ ,  $Q = Q Q_j$ .  
**end for**
  - 2.4 Υπολογισμός  $\beta_k = H_m(k+1, k)$  και  $\sigma_k = Q(m, k)$ .
  - 2.5 Υπολογισμός  $f_k = v_{k+1} \beta_k + f_m \sigma_k$ , όπου  $f_m = h_{m+1, m} e_m^T$ .
  - 2.6 Υπολογισμός  $V_k = V_m Q(:, 1 : k)$  και  $H_k = H_m(1 : k, 1 : k)$ , όπου το  $Q(:, 1 : k)$  δηλώνει τις πρώτες  $k$  στήλες του  $Q$  και το  $H_m(1 : k, 1 : k)$  δηλώνει τον  $k \times k$  κυρίαρχο υποπίνακα του  $H_m$ . Προκύπτει η Arnoldi παραγοντοποίηση  $k$  βημάτων

$$AV_k = V_k H_k + f_k e_k^T$$

- 2.7 Ξεκινώντας με την παραπάνω παραγοντοποίηση  $k$  βημάτων, εφαρμόζουμε  $p$  επιπρόσθετα βήματα στον αλγόριθμο Arnoldi για να πάρουμε την καινούρια παραγοντοποίηση  $m$  βημάτων:  $AV_m = V_m H_m + f_m e_m^T$ .

**Παράδειγμα 3.9.4.** Έστω ο πίνακας

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

του προηγούμενου παραδείγματος. Θα χρησιμοποιήσουμε την implicit restarted Arnoldi method για να βρούμε τις ιδιοτιμές του  $A$ . Έστω επίσης ότι  $m = 3$ ,  $k = 1$  και  $p = 2$ .

1. Υλοποιούμε τον αλγόριθμο Arnoldi method για να προκύψει ότι  $AV = VH + fe^T$  και έχουμε

$$V = \begin{pmatrix} 0.4625 & 0.8485 \\ 0.6949 & -0.1668 \\ 0.5507 & -0.5022 \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} 2.1660 & -0.5874 \\ 2.9493 & -0.5623 \end{pmatrix},$$

$$f = \begin{pmatrix} -0.2429 \\ 0.6607 \\ -0.6297 \end{pmatrix}.$$

2. Συνεχίζοντας τους υπολογισμούς των επόμενων βημάτων του αλγορίθμου βλέπουμε ότι

$$V = \begin{pmatrix} 0.9091 & 0.0031 & 0.4166 & 0 & 0 \\ 0.4131 & 0.1221 & -0.9025 & 0.5027 & -1.3219 \\ 0.0537 & -0.9925 & -0.1097 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

και

$$R = \begin{pmatrix} \boxed{2.0832} & \boxed{-3.0105} & -1.3493 & 0.8600 & -2.2614 \\ \boxed{0.8370} & \boxed{2.0832} & -1.5416 & 1.0010 & -2.6322 \\ 0 & 0 & -\mathbf{1.1663} & 0.5291 & -1.3913 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ο πίνακας  $R$  είναι block διαγώνιος. Αν χρησιμοποιήσουμε την τεχνική deflation στις δύο τελευταίες γραμμές και στήλες του πίνακα  $R$ , παρατηρούμε ότι οι ιδιοτιμές του  $2 \times 2$  πάνω δεξιά υποπίνακα είναι  $2.0832 \pm 1.5874i$ . Άρα οι ιδιοτιμές του πίνακα  $A$  είναι  $-1.1663$  και  $2.0832 \pm 1.5874i$ , όπως ακριβώς στο προηγούμενο παράδειγμα.

### Επιλογή των shifts

Τα shifts πρέπει να επιλεγούν ανάλογα με τις ιδιοτιμές που χρειαζόμαστε. Αν οι ιδιοτιμές του  $H_m$  χωρίζονται σε ‘χρήσιμες’ και ‘άχρηστες’, τότε οι ‘άχρηστες’ μπορούν να επιλεγούν ως shifts  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_p$ . Με αυτή τη μέθοδο, ο πίνακας  $H_m^+$  θα έχει τις  $k$  ‘χρήσιμες’ ιδιοτιμές ως φάσμα. Παραδείγματα ‘χρήσιμων’ ιδιοτιμών είναι οι  $k$  ιδιοτιμές με το μεγαλύτερο ή το μικρότερο πραγματικό μέρος, οι  $k$  ιδιοτιμές με τη μεγαλύτερη ή τη μικρότερη απόλυτη τιμή κτλ.

**Σύγκλιση της μεθόδου**

Ένα ζεύγος Ritz  $(\vartheta, u)$ , όπου  $u = V_m y$  και  $\vartheta$  η ‘χρήσιμη’ ιδιοτιμή, συγκλίνει αν η residual norm  $\|f_k\| |e_k^T y|$  είναι μικρότερη από  $\|H_k\| \epsilon$ .



## Κεφάλαιο 4

# Γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται μία ανάλυση του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών  $Ax = \lambda Bx$ . Σκοπός μας είναι η εύρεση των ιδιοτιμών  $\lambda \in \mathbb{R}$  και των ιδιοδιανυσμάτων  $x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$  του παραπάνω προβλήματος (4.1).

Στην ενότητα 4.1 και 4.2 παρουσιάζονται βασικοί ορισμοί και ιδιότητες του προβλήματος, ενώ στην ενότητα 4.3 θα ασχοληθούμε με τη γενικευμένη real Schur form ενός pencil, η οποία επιτυγχάνεται υλοποιώντας τον αλγόριθμο QZ. Αναλυτική παρουσίαση του αλγορίθμου QZ στην ενότητα 4.4 και του αλγορίθμου εύρεσης γενικευμένων ιδιοδιανυσμάτων στην ενότητα 4.5.

Στις ενότητες 4.6 και 4.7 ασχολούμαστε με άλλους αλγορίθμους που επιλύουν το γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών. Οι αλγόριθμοι αυτοί εκμεταλλεύονται τις ιδιότητες των πινάκων  $A$  και  $B$ , και σε αρκετές περιπτώσεις έχουν χαμηλότερο υπολογιστικό κόστος από τον αλγόριθμο QZ.

Η βιβλιογραφία που χρησιμοποιήθηκε για τις ενότητες 4.1 και 4.2 είναι [5] σελ. 387-389, για την ενότητα 4.3 είναι [5] σελ. 389-390, [3] σελ. 225-226, [12] σελ. 178-179, για την ενότητα 4.4 είναι [5] σελ. 390-398, [9] σελ. 147-155, [7] σελ. 76-91, για την ενότητα 4.5 είναι [5] σελ. 398-399, για την ενότητα 4.6 είναι [5] σελ. 479-480 και για την ενότητα 4.7 είναι [6].

Εφαρμογές του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών δίνονται στο [5] σελ. 405-409.

### 4.1 Το πρόβλημα

Έστω οι  $n \times n$  πίνακες  $A$  και  $B$ . Σκοπός είναι η εύρεση  $n$  βαθμωτών  $\lambda$  και διανυσμάτων  $x \neq 0$ , έτσι ώστε να ισχύει η σχέση

$$Ax = \lambda Bx.$$

**Ορισμός 4.1.1.** Ο πίνακας  $A - \lambda B$  ονομάζεται **matrix pencil** ή **ζεύγος  $(A, B)$** .

**Ορισμός 4.1.2.** Το pencil  $A - \lambda B$  ονομάζεται **ιδιάζον** αν για κάθε  $\lambda$  ισχύει  $\det(A - \lambda B) = 0$ . Αλλιώς ονομάζεται **κανονικό**. Στη συνέχεια πάντα θα υποθέτουμε ότι το pencil είναι κανονικό.

**Ορισμός 4.1.3.** Τα βαθμωτά  $\lambda \in \mathbb{C}$  για τα οποία ισχύει ότι  $\det(A - \lambda B) = 0$  ονομάζονται **ιδιοτιμές** του pencil  $(A, B)$ . Το διάνυσμα  $x \neq 0$  ονομάζεται **δεξί ιδιοδιάνυσμα** του pencil  $(A, B)$  αν ισχύει

$$Ax = \lambda Bx.$$

Το διάνυσμα  $y \neq 0$  ονομάζεται **αριστερό ιδιοδιάνυσμα** του pencil  $(A, B)$  αν ισχύει

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

Το πολυώνυμο  $\det(A - \lambda B)$  ονομάζεται **χαρακτηριστικό πολυώνυμο** του pencil  $(A, B)$ . Οι ιδιοτιμές του pencil  $(A, B)$  είναι οι ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου.

**Παρατήρηση 4.1.4.** Αν ο  $B$  είναι μη ιδιάζων, τότε το κανονικό pencil  $A - \lambda B$  τάξης  $n$  έχει  $n$  ιδιοτιμές. Μία ιδιοτιμή  $\lambda$  του ζεύγους  $(A, B)$  είναι επίσης ιδιοτιμή του  $B^{-1}A$ . Αν ο  $B$  είναι ιδιάζων, τότε το χαρακτηριστικό πολυώνυμο θα είναι βαθμού μικρότερου από  $n$ . Σε αυτή την περίπτωση, θα υπάρχουν λιγότερες από  $n$  ιδιοτιμές και τις υπόλοιπες θα τις θέσουμε  $\infty$ .

## 4.2 Ιδιότητες ιδιοτιμών-ιδιοδιανυσμάτων των ισοδύναμων pencils

**Ορισμός 4.2.1.** Αν  $X$  και  $Y$  είναι μη ιδιάζοντες πίνακες, τότε τα pencil  $(A, B)$  και  $(Y^*AX, Y^*BX)$  ονομάζονται **ισοδύναμα**.

**Ιδιότητες 4.2.2.** (i) Οι ιδιοτιμές δύο ισοδύναμων pencils  $A - \lambda B$  και  $Y^*AX - \lambda Y^*BX$  είναι οι ίδιες.

(ii) Αν το διάνυσμα  $x$  είναι το δεξί ιδιοδιάνυσμα του  $A - \lambda B$ , τότε το  $X^{-1}x$  είναι το δεξί ιδιοδιάνυσμα του  $Y^*AX - \lambda Y^*BX$ .

(iii) Αν το διάνυσμα  $y$  είναι το αριστερό ιδιοδιάνυσμα του  $A - \lambda B$ , τότε το  $Y^{-1}y$  είναι το αριστερό ιδιοδιάνυσμα του  $Y^*AX - \lambda Y^*BX$ .

Άρα για να υπολογίσουμε τις ιδιοτιμές του  $A - \lambda B$ , θα βρούμε ορθογώνιους πίνακες για να μετασχηματίσουμε το ζεύγος  $(A, B)$  σε ένα ισοδύναμό του, του οποίου οι ιδιοτιμές μπορούν να υπολογιστούν πιο εύκολα. Επίσης, αφού θα έχουμε υπολογίσει τα ιδιοδιανύσματα του ισοδύναμου pencil, τα ιδιοδιανύσματα του αρχικού pencil μπορούν εύκολα να βρεθούν με κατάλληλους πολλαπλασιασμούς πινάκων, όπως φαίνεται παραπάνω.



### 4.3 Γενικευμένη Schur και real Schur παραγοντοποίηση

#### 4.3α' Γενικευμένη Schur παραγοντοποίηση

Στην παραγοντοποίηση Schur υπάρχει ορθοκανονικός πίνακας  $U$  τέτοιος ώστε ο πίνακας  $U^*AU$  να είναι άνω τριγωνικός, δηλαδή  $U^*AU = T$ , ενώ στη γενικευμένη Schur παραγοντοποίηση υπάρχουν ορθοκανονικοί πίνακες  $U_1$  και  $U_2$  τέτοιοι ώστε οι πίνακες  $U_1^*AU_2$  και  $U_1^*BU_2$  να είναι άνω τριγωνικοί, δηλαδή

$$U_1^*AU_2 = T_1 = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1n} \\ 0 & t_{22} & \cdots & t_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & t_{nn} \end{pmatrix},$$

$$U_1^*BU_2 = T_2 = \begin{pmatrix} t'_{11} & t'_{12} & \cdots & t'_{1n} \\ 0 & t'_{22} & \cdots & t'_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & t'_{nn} \end{pmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές  $\lambda_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  του κανονικού pencil  $A - \lambda B$  είναι οι  $\lambda_i = \frac{t_{ii}}{t'_{ii}}$ ,  $t'_{ii} \neq 0$ . Οι ιδιοτιμές που αντιστοιχούν στα μηδενικά διαγώνια στοιχεία του  $T_2$  είναι  $\infty$ .

#### 4.3β' Γενικευμένη real Schur παραγοντοποίηση

Ανάλογη με τη real Schur παραγοντοποίηση του  $A$  είναι και η γενικευμένη real Schur παραγοντοποίηση του  $(A, B)$ . Σε αυτή την περίπτωση που οι πίνακες  $A$  και  $B$  είναι πραγματικοί, μπορούμε να επιλέξουμε τους πίνακες  $U_1$  και  $U_2$  ώστε να είναι ορθογώνιοι. Δηλαδή, αν  $A$  και  $B$  είναι πραγματικοί πίνακες, υπάρχουν ορθογώνιοι πίνακες  $Q$  και  $Z$  έτσι ώστε ο

$$Q^T AZ = R$$

να είναι σε άνω real Schur form και ο πίνακας

$$Q^T BZ = T$$

να είναι άνω τριγωνικός. Το ζεύγος  $(R, T)$  ονομάζεται **γενικευμένη real Schur form** του  $(A, B)$ . Τις ιδιοτιμές του  $(A, B)$  τις βρίσκουμε ως εξής: τα  $1 \times 1$  διαγώνια blocks του  $(R, T)$  περιέχουν τις πραγματικές ιδιοτιμές του  $(A, B)$ , ενώ τα  $2 \times 2$  διαγώνια blocks του  $(R, T)$  περιέχουν τις συζυγείς μιγαδικές ιδιοτιμές του  $(A, B)$ .

### 4.4 Ο αλγόριθμος QZ

**QR iteration για τον πίνακα  $A$ :**

Φάση I:  $A \xrightarrow{P} P^T A P = H$ , άνω Hessenberg

Φάση II:  $H \xrightarrow{Q} Q^T H Q = T$ , real Schur

**QZ iteration για το ζεύγος  $(A, B)$ :**

Φάση I:  $A \xrightarrow{Q', Z'} (Q')^T A Z' = A'$ , άνω Hessenberg

$B \xrightarrow{Q', Z'} (Q')^T B Z' = B'$ , άνω τριγωνικός

Φάση II:  $A' \xrightarrow{Q, Z} Q^T A' Z = R$ , άνω real Schur

$B' \xrightarrow{Q, Z} Q^T B' Z = T$ , άνω τριγωνικός

#### 4.4α' Φάση I: Αναγωγή σε άνω Hessenberg και άνω τριγωνική μορφή

Έστω  $A$  και  $B$  δύο  $n \times n$  πίνακες. Τότε:

**Βήμα 1.** Μετατρέπουμε τον πίνακα  $B$  σε άνω τριγωνικό με QR παραγοντοποίηση. Δηλαδή βρίσκουμε ορθογώνιο πίνακα  $U$ , έτσι ώστε ο

$$B \equiv U^T B$$

να είναι άνω τριγωνικός. Θέτουμε

$$A \equiv U^T A.$$

**Βήμα 2.** Κάνουμε αναγωγή του πίνακα  $A$  σε πίνακα άνω Hessenberg και διατηρούμε την τριγωνική μορφή του  $B$ . Μία αναπαράσταση του βήματος 2 σε πίνακα  $4 \times 4$  είναι η εξής:

**2.1** Εφαρμόζουμε μετασχηματισμό Givens  $Q_{34}$  από τα αριστερά του  $A$  για να μηδενιστεί το  $(4, 1)$  στοιχείο του  $A$  και ενημερώνουμε τον  $B$ .

$$A = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Q_{34}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} = Q_{34} A \equiv A,$$

$$B \xrightarrow{Q_{34}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & + & * \end{pmatrix} = Q_{34} B \equiv B.$$

**2.2** Εφαρμόζουμε μετασχηματισμό Givens  $Z_{34}$  από τα δεξιά του  $B$  για να μηδενιστεί το  $(4, 3)$  στοιχείο του  $B$  και ενημερώνουμε τον  $A$ .

$$B = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & + & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Z_{34}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} = B Z_{34} \equiv B,$$

$$A \xrightarrow{Z_{34}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} = AZ_{34} \equiv A.$$

**2.3** Εφαρμόζουμε μετασχηματισμό Givens  $Q_{23}$  από τα αριστερά του  $A$  για να μηδενιστεί το  $(3, 1)$  στοιχείο του  $A$  και ενημερώνουμε τον  $B$ .

$$A = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Q_{23}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} = Q_{23}A \equiv A,$$

$$B \xrightarrow{Q_{23}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & + & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} = Q_{23}B \equiv B.$$

**2.4** Εφαρμόζουμε μετασχηματισμό Givens  $Z_{23}$  από τα δεξιά του  $B$  για να μηδενιστεί το  $(3, 2)$  στοιχείο του  $B$  και ενημερώνουμε τον  $A$ .

$$B = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & + & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Z_{23}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} = BZ_{23} \equiv B,$$

$$A \xrightarrow{Z_{23}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} = AZ_{23} \equiv A.$$

**2.5** Εφαρμόζουμε μετασχηματισμό Givens  $Q_{12}$  από τα αριστερά του  $A$  για να μηδενιστεί το  $(4, 2)$  στοιχείο του  $A$  και ενημερώνουμε τον  $B$ .

$$A = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Q_{12}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} = Q_{12}A \equiv A,$$

$$B \xrightarrow{Q_{12}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ + & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} = Q_{12}B \equiv B.$$

**2.6** Εφαρμόζουμε μετασχηματισμό Givens  $Z_{12}$  από τα δεξιά του  $B$  για να μηδενιστεί το  $(2, 1)$  στοιχείο του  $B$  και ενημερώνουμε τον  $A$ .

$$B = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ + & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Z_{12}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} = BZ_{12} \equiv B,$$

$$A \xrightarrow{Z_{12}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} = AZ_{12} \equiv A.$$

#### Πολυπλοκότητα

$8n^3$  flops. Αν ζητούνται και οι πίνακες  $Q'$  και  $Z'$ , τότε είναι επιπλέον  $4n^3$  και  $3n^3$  flops αντίστοιχα.

#### 4.4β' Φάση II: Αναγωγή σε γενικευμένη real Schur form

Από τη Φάση I έχουμε ότι ο  $A = (Q')^T AZ$  είναι άνω Hessenberg και ο  $B = (Q')^T BZ$  είναι άνω τριγωνικός. Η ιδέα είναι να εφαρμόσουμε ένα iteration step του implicit QR στον πίνακα  $AB^{-1}$ , χωρίς όμως να υπολογίσουμε το γινόμενο αυτό.

#### Ένα iteration step του αλγόριθμου QZ

**Βήμα 1.** Υπολογισμός της πρώτης στήλης του  $N = (C - \alpha_1 I)(C - \alpha_2 I)$ , όπου  $C = AB^{-1}$  και  $\alpha_1$  και  $\alpha_2$  κατάλληλα shifts.

Το δύσκολο μέρος του αλγόριθμου είναι να υπολογίσουμε την πρώτη στήλη του  $N$  χωρίς να υπολογίσουμε το γινόμενο  $C = AB^{-1}$ . Αφού όμως ο  $A$  είναι άνω Hessenberg και ο  $B$  είναι άνω τριγωνικός, η πρώτη στήλη του  $N$  περιέχει το πολύ τρία μη μηδενικά στοιχεία:

$$n_1 = Ne_1 = (C - \alpha_1 I)(C - \alpha_2 I)e_1 = (x, y, z, 0, \dots, 0)^T.$$

Για να υπολογίσουμε τα  $x$ ,  $y$  και  $z$  χρειαζόμαστε μόνο τις πρώτες δύο στήλες του  $C$ , τις οποίες μπορούμε να πάρουμε αν αντιστρέψουμε τον  $2 \times 2$  αρχικό υποπίνακα του  $B$ . Δε χρειάζεται να υπολογίσουμε ολόκληρο τον  $B^{-1}$ . Έτσι, αν  $c_1$  και  $c_2$  είναι οι πρώτες δύο στήλες του  $C = AB^{-1}$ , τότε

$$(c_1, c_2) = (\alpha_1, \alpha_2) \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ 0 & b_{22} \end{pmatrix}^{-1},$$

όπου  $\alpha_i$ ,  $i = 1, 2$ , είναι οι πρώτες δύο στήλες του  $A$ . Η  $c_1$  στήλη έχει το πολύ δύο μη μηδενικά στοιχεία και η  $c_2$  στήλη έχει το πολύ τρία. Έστω, λοιπόν, ότι ισχύει

$c_1 = (c_{11}, c_{12}, 0, \dots, 0)^T$  και  $c_2 = (c_{12}, c_{22}, c_{32}, 0, \dots, 0)^T$ . Τότε είναι εύκολο να δούμε ότι

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (c_{11} - \alpha_1)(c_{11} - \alpha_2) + c_{12}c_{21} \\ c_{21}(c_{11} - \alpha_2) + c_{21}(c_{22} - \alpha_1) \\ c_{21}c_{32} \end{pmatrix}.$$

**Βήμα 2.** Εύρεση πίνακα Householder  $Q_1$ , έτσι ώστε ο  $Q_1 N e_1$  να είναι πολλαπλάσιο του  $e_1$ .

Αφού η πρώτη στήλη  $n_1$  του  $N = (C - \alpha_1 I)(C - \alpha_2 I)$  έχει το πολύ τρία μη μηδενικά στοιχεία, ο πίνακας Householder  $Q_1$ , που μετατρέπει τη στήλη  $n_1$  σε πολλαπλάσιο του  $e_1$ , έχει τη μορφή

$$Q_1 = \begin{pmatrix} \hat{Q}_1 & 0 \\ 0 & I_{n-3} \end{pmatrix},$$

όπου  $\hat{Q}_1$  είναι ένας  $3 \times 3$  πίνακας Householder.

**Βήμα 3.** Σχηματισμός του  $Q_1 A$  και  $Q_1 B$ .

**Βήμα 4.** Ταυτόχρονος μετασχηματισμός του  $Q_1 A$  στον άνω Hessenberg πίνακα  $A_1$  και του  $Q_1 B$  στον άνω τριγωνικό πίνακα  $B_1$ . Αυτό γίνεται βρίσκοντας ορθογώνιους πίνακες  $Q$  και  $Z$ , που είναι τέτοιοι ώστε να ισχύει  $Q(Q_1 A)Z = A_1$  (άνω Hessenberg) και  $Q(Q_1 B)Z = B_1$  (άνω τριγωνικός). Με το θεώρημα implicit Q δείχνουμε ότι ο πίνακας  $A_1 B_1^{-1}$  είναι ουσιαστικά ο ίδιος που θα παίρναμε αν είχαμε εφαρμόσει implicit QR iteration κατευθείαν στον  $AB^{-1}$ .

Οι πίνακες  $Q_1 A$  και  $Q_1 B$  έχουν την παρακάτω μορφή:

$$A \equiv Q_1 A = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ + & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}, \quad B \equiv Q_1 B = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ + & * & * & * & * & * \\ + & + & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix}.$$

Άρα, έχει χαθεί η μορφή άνω Hessenberg του  $A$  και η άνω τριγωνική μορφή του  $B$ . Αυτό διορθώνεται επαναληπτικά:

(i) Εφαρμόζουμε πίνακες Householder  $Z_1$  και  $Z_2$  στα δεξιά του  $B$ .

$$B = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ + & * & * & * & * & * \\ + & + & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Z_1} BZ_1 = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ + & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Z_2} BZ_1Z_2 = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} \equiv B.$$

Ενημερώνουμε τον  $A$ .

$$A = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ + & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Z_1Z_2} AZ_1Z_2 = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ + & * & * & * & * & * \\ + & + & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} \equiv A.$$

(ii) Εφαρμόζουμε πίνακα Householder  $Q_2$  στα αριστερά του  $A$ .

$$A = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ + & * & * & * & * & * \\ + & + & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Q_2} Q_2A = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & \boxed{* & * & * & * & *} \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & + & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} \equiv A.$$

Ενημερώνουμε τον  $B$ .

$$B = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Q_2} Q_2B = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ 0 & \boxed{* & * & * & * & *} \\ 0 & + & * & * & * & * \\ 0 & + & + & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} \equiv B.$$

Οι υποπίνακες που βρίσκονται μέσα στα πλαίσια έχουν την ίδια δομή με τους αρχικούς πίνακες  $Q_1A$  και  $Q_1B$ . Άρα χρησιμοποιούμε την τεχνική deflation και δουλεύουμε στους υποπίνακες.

#### Αλγόριθμος 4.4.1. Ένα Iteration Step του Αλγορίθμου QZ

##### ΕΙΣΟΔΟΣ

(i) Πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  μη ανηγμένος άνω Hessenberg. (ii) Πίνακας  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  άνω τριγωνικός.

##### ΕΞΟΔΟΣ

Οι ορθογώνιοι πίνακες  $Q$  και  $Z$ , που είναι τέτοιοι ώστε ο  $A_1 = Q^T A Z$  να είναι άνω Hessenberg και ο  $B_1 = Q^T B Z$  να είναι άνω τριγωνικός.

1. Επιλογή των shifts  $\alpha_1$  και  $\alpha_2$ .
2. Υπολογισμός της πρώτης στήλης του  $N = (C - \alpha_1 I)(C - \alpha_2 I)$ , όπου  $C = AB^{-1}$  χωρίς τον υπολογισμό του γινομένου  $C = AB^{-1}$ . Έστω  $(c_1, c_2)$  οι πρώτες δύο στήλες του  $C$ . Τότε  $(c_1, c_2) = (\alpha_1, \alpha_2) \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ 0 & b_{22} \end{pmatrix}^{-1}$  και τα τρία μη μηδενικά στοιχεία της πρώτης στήλης του  $N$  είναι τα:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (c_{11} - \alpha_1)(c_{11} - \alpha_2) + c_{12}c_{21} \\ c_{21}(c_{11} - \alpha_2) + c_{21}(c_{22} - \alpha_1) \\ c_{21}c_{32} \end{pmatrix}.$$

3. Εύρεση του πίνακα Householder  $Q_1$ , που είναι τέτοιος ώστε

$$Q_1 n_1 = \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

4. Σχηματισμός του  $Q_1A$  και  $Q_1B$ .
5. Ορθογώνιος μετασχηματισμός των πινάκων  $Q_1A$  και  $Q_1B$  στον άνω Hessenberg πίνακα  $A_1$  και στον άνω τριγωνικό πίνακα  $B_1$  αντίστοιχα, δημιουργώντας τους ορθογώνιους πίνακες  $Q_2$  έως  $Q_{n-1}$  και  $Z_1$  έως  $Z_{n-1}$ .

#### Πολυπλοκότητα

$22n^2$  flops. Αν οι πίνακες  $Q$  και  $Z$  πρέπει να υπολογιστούν, τότε απαιτούνται επιπλέον  $8n^2$  και  $13n^2$  flops αντίστοιχα.

**Εξασφάλιση των πινάκων  $Q$  και  $Z$** 

Ο πίνακας  $Q$  δίνεται από τη σχέση  $Q = Q_1 Q_2 \cdots Q_{n-1}$  και ο πίνακας  $Z$  από τη σχέση  $Z = Z_1 Z_2 \cdots Z_{n-1}$ .

**Επιλογή των shifts**

Τα double shifts  $\alpha_1$  και  $\alpha_2$  στο iteration step του QZ μπορούν να είναι οι ιδιοτιμές του κάτω δεξιά  $2 \times 2$  υποπίνακα του  $C = AB^{-1}$ .

**Αλγόριθμος 4.4.2. Ο Αλγόριθμος QZ****ΕΙΣΟΔΟΣ**

(i) Πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . (ii) Πίνακας  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

**ΕΞΟΔΟΣ**

(i) Ο πίνακας  $R$ , η real Schur form του  $A$ . (ii) Ο πίνακας  $T$ , άνω τριγωνικός. Το ζεύγος  $(R, T)$  περιέχει τις ιδιοτιμές του  $(A, B)$ .

1. Ορθογώνιος μετασχηματισμός του  $(A, B)$  σε άνω Hessenberg-τριγωνικό ζεύγος (υποθέτουμε ότι ο  $A$  είναι μη ανηγγμένος):

$$A \equiv Q^T A Z, \text{ άνω Hessenberg,}$$

$$B \equiv Q^T B Z, \text{ άνω τριγωνικός.}$$

2. Επαναληπτική χρήση του αλγορίθμου ένα iteration step του QZ για να παραχθεί η ακολουθία των  $\{A_k\}$  και  $\{B_k\}$ , διαλέγοντας τα κατάλληλα shifts κάθε φορά.
3. Οι ακολουθίες των  $\{A_k\}$  και  $\{B_k\}$  συγκλίνουν:

$$\{A_k\} \rightarrow R, \text{ real Schur form,}$$

$$\{B_k\} \rightarrow T, \text{ άνω τριγωνικός.}$$

**Πολυπλοκότητα**

$30n^3$  flops. Αν οι πίνακες  $Q$  και  $Z$  πρέπει να υπολογιστούν, τότε απαιτούνται επιπλέον  $16n^3$  και  $20n^3$  flops αντίστοιχα.

**Παράδειγμα 4.4.3.** Έστω οι πίνακες

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix},$$



όπου  $A$  άνω Hessenberg και  $B$  άνω τριγωνικός. Ο  $2 \times 2$  κυρίαρχος υποπίνακας του  $B$  είναι  $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  και ο αντίστροφός του είναι  $\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ . Βρίσκουμε το γινόμενο

$$(c_1, c_2) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & -3 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Επιλέγουμε τα shifts  $\alpha_1 = 1$  και  $\alpha_2 = 1$  και προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} x &= (1 - 1)(1 - 1) + (-1) \cdot 2 = -2, \\ y &= 2 \cdot (1 - 1) + 2 \cdot (-3 - 1) = -8, \\ z &= 2 \cdot 1 = 2. \end{aligned}$$

Η πρώτη στήλη του  $N$  είναι

$$n_1 = \begin{pmatrix} -2 \\ -8 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Βρίσκουμε πίνακα  $Q_1$  ώστε να ισχύει ότι

$$Q_1 n_1 = \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ο πίνακας  $Q_1$  είναι

$$Q_1 = \begin{pmatrix} -0.2356 & -0.9428 & 0.2357 & 0 \\ -0.9428 & 0.2807 & 0.1798 & 0 \\ 0.2357 & 0.1798 & 0.9550 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

και έτσι

$$\begin{aligned} Q_1 A &= \begin{pmatrix} -2.1212 & -0.9427 & -3.7711 & -0.9427 \\ -0.3814 & -0.4823 & 0.3598 & -0.4823 \\ 0.5953 & 1.3705 & 1.9099 & 1.3705 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \\ Q_1 B &= \begin{pmatrix} -0.2356 & -1.4140 & -1.4139 & -1.4138 \\ -0.9428 & -1.6049 & -2.3679 & -3.1309 \\ 0.2357 & 0.6512 & 1.8419 & 3.0326 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Αυτό ήταν ένα iteration step του αλγορίθμου QZ. Στη συνέχεια μετατρέπουμε τους πίνακες  $Q_1A$  και  $Q_1B$  σε άνω Hessenberg και άνω τριγωνικό αντίστοιχα και επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία. Το τελικό αποτέλεσμα που θα λάβουμε είναι δύο πίνακες  $Q$  και  $Z$  έτσι ώστε

$$R \equiv Q^T A Z, \text{ άνω Hessenberg,} \\ T \equiv Q^T B Z, \text{ άνω τριγωνικός.}$$

Έτσι λοιπόν, προκύπτει ότι

$$Q = \begin{pmatrix} 0.1535 & 0.9382 + 0.0002i & -0.2929 & 0.1021 \\ -0.5367 + 0.3296i & 0.1043 + 0.1274i & 0.2176 + 0.5395i & 0.4731 - 0.1183i \\ 0.2746 - 0.4069i & 0.1719 + 0.1194i & 0.6809 + 0.3068i & -0.0394 + 0.3949i \\ 0.5821 & -0.2211 & -0.1344 & 0.7709 \end{pmatrix},$$

$$Z = \begin{pmatrix} -0.7358 + 0.0001i & -0.3716 + 0.4720i & -0.0809 + 0.2731i & 0.1289 \\ 0.6510 - 0.0001i & -0.4122 + 0.3739i & 0.0653 + 0.4675i & 0.2088 \\ -0.1858 & 0.0395 - 0.5559i & 0.5321 + 0.5262i & 0.3080 \\ 0.0175 & 0.1325 + 0.0351i & -0.1818 - 0.3208i & 0.9192 \end{pmatrix},$$

$$R = \begin{pmatrix} -1.6480 & -0.8172 - 0.7770i & 1.7008 + 2.5944i & 2.4007 + 0.0004i \\ 0 & 0.2886 - 1.0054i & -0.7376 + 0.5565i & 0.3261 + 1.4788i \\ 0 & 0 & 0.4425 + 1.5416i & 1.8092 + 0.6012i \\ 0 & 0 & 0 & 1.0852 \end{pmatrix},$$

$$T = \begin{pmatrix} 0.5146 & -0.3580 - 0.0320i & 0.4259 + 0.7978i & 1.7903 + 0.0003i \\ 0 & 0.9176 & -1.3042 - 0.7059i & -0.8412 + 2.7113i \\ 0 & 0 & 1.4070 & 3.0132 - 0.1750i \\ 0 & 0 & 0 & 4.5160 \end{pmatrix}.$$

Άρα οι ιδιοτιμές του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών είναι  $-3.2025, 0.2403, 0.3145 \pm 1.0957i$ .

#### 4.5 Υπολογισμός γενικευμένων ιδιοδιανυσμάτων

Αφού έχει υπολογιστεί μια ιδιοτιμή  $\lambda$  του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών, το αντίστοιχο γενικευμένο ιδιοδιάνυσμα υπολογίζεται χρησιμοποιώντας inverse iteration.

##### **Αλγόριθμος 4.5.1. Υπολογισμός Γενικευμένου Ιδιοδιανύσματος** **ΕΙΣΟΔΟΣ**

(i) Πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . (ii) Πίνακας  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . (iii) Προσέγγιση της ιδιοτιμής  $\lambda$  του matrix pencil  $A - \lambda B$ .

##### **ΕΞΟΔΟΣ**

Μία προσέγγιση  $v$  του ιδιοδιανύσματος του matrix pencil  $A - \lambda B$ .

1. Επιλογή της αρχικής προσέγγισης  $v_0$  του ιδιοδιανύσματος.
2. **for**  $k = 1, 2, \dots$  **do**
  - 2.1 Επίλυση του συστήματος  $(A - \lambda B)\hat{v}_k = Bv_{k-1}$ .
  - 2.2 Κανονικοποίηση του διανύσματος  $v_k = \frac{\hat{v}_k}{\|\hat{v}_k\|_2}$ .
- end for**

## 4.6 Οι αλγόριθμοι Arnoldi και Lanczos

Οι αλγόριθμοι Arnoldi και Lanczos που περιγράφηκαν για το κανονικό πρόβλημα ιδιοτιμών, μπορούν να εφαρμοστούν και στο γενικευμένο πρόβλημα  $Ax = \lambda Bx$ , όταν το πρόβλημα αυτό αναχθεί στο κανονικό. Διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

1. Αν ο  $B$  είναι μη ιδιάζων, τότε το γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών είναι ισοδύναμο με το πρόβλημα

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

Για να εφαρμόσουμε τους αλγόριθμους Arnoldi ή Lanczos στον  $B^{-1}A$ , πρέπει να υπολογίσουμε το γινόμενο  $r = (B^{-1}A)y$ . Αυτό μπορούμε να το επιτύχουμε χωρίς να βρούμε τον  $B^{-1}$ , δηλαδή

- (i) Θέτουμε  $u = Ay$ .
- (ii) Λύνουμε ως προς  $r$  το  $Br = u$ .

Μπορούμε, επίσης, στους παραπάνω υπολογισμούς να εκμεταλλευτούμε το γεγονός ότι ο πίνακας  $A$  είναι αραιός.

2. Αν ο  $A$  και ο  $B$  είναι ιδιάζοντες ή ο  $B$  είναι ill-conditioned πίνακας, τότε μία χρήσιμη τεχνική είναι η shift-and-invert, η οποία λειτουργεί ως εξής:

Έστω  $\sigma$  ένα shift που επιλέγεται από το χρήστη, έτσι ώστε ο πίνακας  $A - \sigma B$  να είναι μη ιδιάζων. Τότε το γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών ανάγεται στο κανονικό πρόβλημα

$$Cx = \mu x, \quad \text{όπου } C = (A - \sigma B)^{-1}B \quad \text{και} \quad \mu = \frac{1}{\lambda - \sigma}.$$

Για να εφαρμόσουμε τους αλγόριθμους Arnoldi ή Lanczos στον  $C$ , πρέπει να υπολογίσουμε το γινόμενο  $r = Cy$ , χωρίς όμως να υπολογίσουμε τον αντίστροφο.

- (i) Βρίσκουμε την LU παραγοντοποίηση:  $A - \sigma B = LU$ .
- (ii) Θέτουμε  $v = By$ .

- (iii) Λύνουμε ως προς  $w$  το  $Lw = v$ .
- (iv) Λύνουμε ως προς  $r$  το  $Ur = w$ .

Τέλος, εφαρμόζουμε την implicit restarted Arnoldi method για να βρούμε τις ιδιοτιμές.

## 4.7 Οι αλγόριθμοι HMDR και FMDR

### 4.7α' Εισαγωγή

Ο πιο γνωστός αλγόριθμος για την επίλυση του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών

$$Ax = \lambda Bx,$$

όπου  $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , είναι ο αλγόριθμος QZ. Ξεκινάει με  $A_0 = A$  και  $B_0 = B$ , δημιουργώντας τις ακολουθίες πινάκων

$$A_{i+1} = Q_i^T A_i Z_i, \quad B_{i+1} = Q_i^T B_i Z_i,$$

όπου  $A_{i+1}$  άνω Hessenberg και  $B_{i+1}$  άνω τριγωνικοί πίνακες. Ο αλγόριθμος αυτός είναι ευσταθής, ακόμα και αν ο πίνακας  $B$  είναι ιδιάζων ή σχεδόν ιδιάζων. Όμως, βασικό μειονέκτημα του αλγόριθμου είναι το γεγονός ότι ο  $B$  είναι 'γεμάτος' άνω τριγωνικός αντί να είναι διαγώνιος. Για πραγματικούς συμμετρικούς πίνακες  $A$  και  $B$ , υπάρχει η μέθοδος MDR που εκμεταλλεύεται τη συμμετρική δομή και διατηρεί τον  $B$  σε διαγώνια μορφή, υπό την προϋπόθεση ότι είναι θετικά ημιορισμένος.

Έχοντας υπόψιν τον αλγόριθμο MDR, για τον οποίο γίνεται πλήρης ανάλυση στο επόμενο κεφάλαιο, μπορούμε να ανάγουμε τον πίνακα  $A$  σε σχεδόν τριγωνικό, ενώ θα διατηρούμε τον  $B$  σε διαγώνια μορφή, ακόμα για τυχαίους πίνακες  $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών. Ο μετασχηματισμός του αλγόριθμου MDR ελαχιστοποιεί τον δείκτη κατάστασης του προβλήματος ως προς τη  $\|\cdot\|_2$ . Εισάγουμε, λοιπόν, δύο παραλλαγές του αλγόριθμου αυτού, τον Householder MDR (HMDR) και τον Fast MDR (FMDR), με περίπου ίδιους δείκτες κατάστασης αλλά λιγότερους υπολογισμούς.

Οι αλγόριθμοι HMDR και FMDR ξεκινούν με  $A_0 = A$  και  $B_0 = B$  και κατασκευάζουν τις ακολουθίες πινάκων

$$A_{i+1} = M_i^T A_i M_i, \quad B_{i+1} = M_i^T B_i M_i,$$

έτσι ώστε ο πίνακας  $A_{i+1} - \lambda B_{i+1}$  να είναι πάντα σε Hessenberg διαγώνια μορφή. Κάτω από κατάλληλες συνθήκες, ο  $A_{i+1}$  να τείνει να γίνει σχεδόν τριγωνικός καθώς  $i \rightarrow \infty$ .

### 4.7β' Αρχική αναγωγή

Πριν εφαρμόσουμε το βασικό μετασχηματισμό στο pencil  $A - \lambda B$ , ο  $B$  πρέπει να αναχθεί στον θετικά ημιορισμένο διαγώνιο πίνακα  $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$  με μία ευσταθή διαδικασία. Έτσι, υπάρχει ορθογώνιος πίνακας  $Q$  και πίνακας διαταραχής  $\pi$  έτσι ώστε

$$\pi B Q^T = R,$$

όπου  $R$  άνω τριγωνικός πίνακας, τα στοιχεία  $r_{ij}$  του  $R$  ικανοποιούν τη σχέση  $|r_{ii}| \geq |r_{ji}|$  για  $j = 1, 2, \dots, i-1$  και τα  $|r_{ii}|$  είναι σε αύξουσα σειρά. Μετά, χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο του Gauss, ο  $R$  ανάγεται στο διαγώνιο πίνακα  $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$  με ευσταθή τρόπο, όπου  $d_n \geq d_{n-1} \geq \dots \geq d_1 \geq 0$ . Άρα η μορφή του προβλήματος μπορεί να θεωρηθεί η ακόλουθη:

$$Ax = \lambda Dx.$$

Θεωρούμε τώρα τους βασικούς MDR, HMDR και FMDR μετασχηματισμούς. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, το πρόβλημα μηδενισμού του στοιχείου  $\alpha_{ji}$  του  $A$  θεωρείται πρόβλημα δύο διαστάσεων. Έστω

$$\alpha = \begin{pmatrix} s \\ t \end{pmatrix}, \quad t \neq 0, \quad D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 \\ 0 & d_2 \end{pmatrix} \geq 0, \quad b = \begin{pmatrix} d_2 s \\ d_1 t \end{pmatrix},$$

και μη ιδιάζων πίνακας  $M$ , για τον οποίο ισχύει ότι

$$M^T \alpha = \begin{pmatrix} k \\ 0 \end{pmatrix}, \quad M^T D M = \begin{pmatrix} c_1 & 0 \\ 0 & c_2 \end{pmatrix}.$$

Η γενική μορφή του πίνακα  $M^T$  είναι

$$M^T = \begin{pmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{d_2 s}{\|b\|_2} & \frac{d_1 t}{\|b\|_2} \\ -t & s \\ \frac{\| \alpha \|_2}{\| \alpha \|_2} & \frac{\| \alpha \|_2}{\| \alpha \|_2} \end{pmatrix},$$

όπου  $k_1$  και  $k_2$  είναι μη μηδενικά βαθμωτά. Στα επόμενα θεωρούμε τρεις ειδικές επιλογές του πίνακα  $M^T$ .

#### 4.7γ' Βασικός μετασχηματισμός MDR

Επιλέγουμε  $k_1 = k_2 = 1$ . Τότε

$$c_1 = d_1 d_2 \frac{(b, \alpha)}{\|b\|_2^2}, \quad c_2 = \frac{(b, \alpha)}{\|\alpha\|_2^2}.$$

Επίσης,

$$\min \{d_1, d_2\} \leq c_l \leq \max \{d_1, d_2\} \quad \text{για } l \in \{1, 2\}$$

και

$$\text{Cond}_2(M) = \sqrt{\frac{1+\alpha}{1-\alpha}},$$

$$\text{όπου } \alpha = \left| \frac{st(d_1 - d_2)}{\|b\|_2 \|\alpha\|_2} \right| < 1.$$

#### 4.7δ' Βασικός μετασχηματισμός HMDR

Εδώ ο πίνακας  $M^T$  έχει τη μορφή

$$M^T = I - \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-u & -\alpha u \\ -v & 1-\alpha v \end{pmatrix}.$$

Το γινόμενο του  $M^T$  με ένα διάνυσμα χρειάζεται τρεις πολλαπλασιασμούς, αντί για τέσσερις που χρειάζεται ο μετασχηματισμός MDR. Υπάρχει μία ελεύθερη παράμετρος στα  $u, v$  και  $\alpha$ . Θα θέλαμε ο  $M^T$  να ικανοποιεί τα ακόλουθα (i) ο  $\text{Cond}_2(M^T)$  να είναι όσο το δυνατόν μικρότερος, (ii) οι νόρμες  $\|M^T\|_F, \|M^{-T}\|_F$  να μην είναι πολύ μεγάλες, (iii) να ικανοποιείται η ανισότητα  $\min\{d_1, d_2\} \leq c_l \leq \max\{d_1, d_2\}$  για  $l \in \{1, 2\}$  και (iv) τα  $u, v$  και  $\alpha$  να υπολογίζονται εύκολα. Όμως οι συνθήκες αυτές δε μπορούν να πραγματοποιηθούν ταυτόχρονα. Μία καλή επιλογή είναι η επόμενη:

Θέτουμε  $\xi = \frac{s}{t}$ ,  $\eta = \frac{d_2}{d_1}$  και έστω  $v = -\frac{\text{sign}(\xi)}{\sqrt{1+\xi^2}}$ . Τότε τα  $k_1, k_2$  δίνονται από τις σχέσεις

$$k_1 = \text{sign}(s) \frac{(\sqrt{1+\xi^2} + |\xi|) \sqrt{1+\xi^2\eta^2}}{1 + |\xi\eta| (\sqrt{1+\xi^2} + |\xi|)}, \quad k_2 = -\text{sign}(s),$$

και τα  $\alpha, u$  από τις σχέσεις

$$\alpha v = 1 - \xi v, \quad u = \frac{1}{1 - \xi\eta\alpha}.$$

**Θεώρημα 4.7.1.** Αν  $v = -\frac{\text{sign}(\xi)}{\sqrt{1+\xi^2}}$ , τότε

$$\min\{d_1, d_2\} \leq c_1, c_2 \leq \max\{d_1, d_2\}$$

και το  $c_2$  είναι το ίδιο με τον αλγόριθμο MDR, δηλαδή  $c_2 = \frac{(b, \alpha)}{\|\alpha\|_2^2}$ .

*Απόδειξη.* (i) Για το  $c_1$ : Από τις σχέσεις  $\alpha v = 1 - \xi v$  και  $u = \frac{1}{1 - \xi\eta\alpha}$  έχουμε ότι

$$\alpha = -\xi - \text{sign}(\xi)\sqrt{1+\xi^2}.$$

Άρα,  $\xi\alpha \leq 0$  και  $\alpha^2 + 2\xi\alpha - 1 = 0$ , και από τον ορισμό του  $c_1$  έχουμε

$$c_1 = d_1(1-u)^2 + d_2(\alpha u)^2 = \frac{d_1 d_2}{(d_1 - d_2 \xi \alpha)_2} (d_2 \xi^2 \alpha^2 + d_1 \alpha^2).$$

Η σχέση αυτή, αντικαθιστώντας τα προηγούμενα, γίνεται

$$c_1 = d_2 \left[ \frac{d_1^2}{(d_1 - d_2 \xi \alpha)^2} \right] + d_1 \left[ \frac{d_2^2 \xi^2 \alpha^2 - 2d_1 d_2 \xi \alpha}{(d_1 - d_2 \xi \alpha)^2} \right],$$

η οποία δείχνει ότι οι σταθερές  $d_1$  και  $d_2$  είναι μη αρνητικές και αθροίζουν στη μονάδα. Έτσι

$$\min \{d_1, d_2\} \leq c_1 \leq \max \{d_1, d_2\}.$$

- (ii) Για το  $c_2$ : Η απόδειξη είναι ίδια με του αλγόριθμου MDR και φαίνεται από το γεγονός ότι  $k_2 = -\text{sign}(s)$ . □

**Θεώρημα 4.7.2.** Αν  $v = -\frac{\text{sign}(\xi)}{\sqrt{1+\xi^2}}$ ,  $|\xi\eta| \geq 1$  και  $\xi \neq 0$ , τότε

(i)  $\frac{1}{\sqrt{2}} \leq |k_1| \leq \sqrt{2}.$

(ii)  $R = \frac{\text{Cond}_2(M) \text{ του HMDR}}{\text{Cond}_2(M) \text{ του MDR}} \leq \sqrt{2}.$

Απόδειξη. (i) Έστω

$$f(\xi, \eta) = \frac{\left(\sqrt{1+\xi^2} + |\xi|\right) \sqrt{1+\xi^2\eta^2}}{1 + |\xi\eta| \left(\sqrt{1+\xi^2} + |\xi|\right)} = |k_1|.$$

Θέτω  $x = \sqrt{1+\xi^2} + |\xi|$  και  $y = |\xi\eta|$ , και έτσι

$$f(\xi, \eta) = \hat{f}(x, y) = \frac{x\sqrt{1+y^2}}{1+xy}.$$

Αφού  $\xi \neq 0$  και  $|\xi\eta| \geq 1$ , για τις καινούριες μεταβλητές  $x$  και  $y$  ισχύει ότι  $x > 1$  και  $y \geq 1$ . Επιπλέον, αφού  $\frac{\partial \hat{f}}{\partial x} = \frac{\sqrt{1+y^2}}{(1+xy)^2} > 0$  για κάθε  $x > 1$  και για κάθε  $y \geq 1$ , η συνάρτηση  $\hat{f}(\cdot, y)$  είναι γνησίως αύξουσα για κάθε  $y \geq 1$  και

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \hat{f}(x, y) = \sqrt{\frac{1}{y^2} + 1}.$$

Άρα

$$\sup_{\substack{x \geq 1 \\ y \geq 1}} \hat{f}(x, y) = \sup_{y \geq 1} \sqrt{\frac{1}{y^2} + 1} = \sqrt{2}$$

και

$$\inf_{\substack{x \geq 1 \\ y \geq 1}} \hat{f}(x, y) = \inf_{y \geq 1} \frac{\sqrt{1+y^2}}{1+y} = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

(ii) Από το (i) βρίσκουμε ότι

$$\text{Cond}_2(K) \equiv \text{Cond}_2(\text{diag}(k_1, 1)) \leq \sqrt{2}.$$

Επίσης, ισχύει  $M_{\text{HMDR}}^T = K M_{\text{MDR}}^T$  και άρα

$$R \leq \text{Cond}_2(K) \leq \sqrt{2}.$$

□

Η υπόθεση  $|\xi\eta| \geq 1$  δεν είναι αυστηρή. Μπορεί να επιτευχθεί και με μία διαταραχή. Συνοψίζοντας όλα τα παραπάνω σε τέσσερις περιπτώσεις, βλέπουμε τις μορφές που μπορεί να πάρει ο πίνακας  $M^T$ .

(i)  $s = 0$ . Τότε

$$v = -1, \quad \alpha = -1, \quad u = 1.$$

(ii)  $s \neq 0, d_1 = d_2 = 0$  ( $\eta = 1$ ). Τότε

$$v = -\frac{\text{sign}(\xi)}{\sqrt{1+\xi^2}}, \quad \alpha = -\text{sign}(\xi)\sqrt{1+\xi^2} - \xi,$$

$$u = \frac{1}{1-\xi\alpha} = \frac{1}{1+|\xi|(\sqrt{1+\xi^2}+|\xi|)}.$$

(iii)  $s \neq 0, d_1 = 0, d_2 \neq 0$ . Τότε

$$v = -\frac{\text{sign}(\xi)}{\sqrt{1+\xi^2}}, \quad \alpha = -\text{sign}(\xi)\sqrt{1+\xi^2} - \xi, \quad u = 0.$$

(iv)  $s \neq 0, d_1 \neq 0$ . Αν  $|\xi\eta| < 1$ , εφαρμόζουμε μια μετάθεση στην αρχή. Τότε

$$v = -\frac{\text{sign}(\xi)}{\sqrt{1+\xi^2}}, \quad \alpha = -\text{sign}(\xi)\sqrt{1+\xi^2} - \xi, \quad u = \frac{1}{1-\xi\eta\alpha}.$$

#### 4.7ε' Βασικός μετασχηματισμός FMDR

Έχουμε τις εξής επιλογές:

(i)  $s \neq 0, \alpha = -\xi, \beta = \xi\eta$ ,

$$M^T = \begin{pmatrix} \beta & 1 \\ 1 & \alpha \end{pmatrix}.$$

Τότε

$$M^T \alpha = \begin{pmatrix} t(1+r) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad M^T D M = \begin{pmatrix} d_2(1+r) & 0 \\ 0 & d_1(1+r) \end{pmatrix},$$

όπου  $r = \xi^2\eta$ .



$$(ii) \ s \neq 0, \alpha = \frac{1}{\xi\eta}, \beta = -\frac{1}{\xi},$$

$$M^T = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ \beta & 1 \end{pmatrix}.$$

Τότε

$$M^T \alpha = \begin{pmatrix} s(1+r) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad M^T D M = \begin{pmatrix} d_1(1+r) & 0 \\ 0 & d_2(1+r) \end{pmatrix},$$

$$\text{όπου } r = \frac{1}{\xi^2 \eta}.$$

Με το επόμενο θεώρημα έχουμε το κριτήριο κατά το οποίο ο αλγόριθμος MDR μπορεί να αντικατασταθεί από τον αλγόριθμο FMDR, χωρίς να επηρεαστεί ιδιαίτερα η ευστάθεια του προβλήματος.

**Θεώρημα 4.7.3.** Αν ισχύει  $\{|\xi| \leq 1 \text{ και } |\xi\eta| \leq 1\}$  ή  $\{|\xi| \geq 1 \text{ και } |\xi\eta| \geq 1\}$ , τότε για τις περιπτώσεις (i) και (ii) ισχύει ότι

$$R = \frac{\text{Cond}_2(M) \text{ του FMDR}}{\text{Cond}_2(M) \text{ του MDR}} \leq \sqrt{2} \quad \text{και} \quad r \leq 1.$$



## Κεφάλαιο 5

# Συμμετρικό γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών

Στο κεφάλαιο αυτό ασχολούμαστε με το εξίσου σημαντικό ως προς τις εφαρμογές πρόβλημα, το συμμετρικό γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών  $Ax = \lambda Bx$ , όπου οι  $A$  και  $B$  είναι συμμετρικοί πίνακες και ο  $B$  είναι θετικά ορισμένος (5.1).

Στην ενότητα 5.3 παρουσιάζεται ο αλγόριθμος του Cholesky και στην ενότητα 5.4 μία παραλλαγή του που διαγωνοποιεί ταυτόχρονα τους πίνακες  $A$  και  $B$ . Στη συνέχεια, στην ενότητα 5.5 ασχολούμαστε συνοπτικά με τον αλγόριθμο Lanczos, ο οποίος ανάγει το πρόβλημα στο κανονικό πρόβλημα ιδιοτιμών.

Τέλος, στην ενότητα 5.6 παρουσιάζεται ο αλγόριθμος MDR, ο οποίος αξιοποιεί πλήρως τη συμμετρία των πινάκων με χαμηλό υπολογιστικό κόστος.

Η βιβλιογραφία που χρησιμοποιήθηκε για τις ενότητες 5.1 έως 5.5 είναι [5] σελ. 399-404, σελ. 480-481, [3] σελ. 226-227, [12] σελ. 179, [10] σελ. 463-465 και για την ενότητα 5.6 είναι [1].

Εφαρμογές του συμμετρικού γενικευμένου θετικά ορισμένου προβλήματος ιδιοτιμών δίνονται στο [5] σελ. 409-418 και στο [3] σελ. 238-240.

### 5.1 Το πρόβλημα

Το συμμετρικό θετικά ορισμένο γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών είναι το

$$Ax = \lambda Bx,$$

όπου οι  $A$  και  $B$  είναι συμμετρικοί  $n \times n$  πίνακες και ο  $B$  είναι θετικά ορισμένος πίνακας.

**Θεώρημα 5.1.1.** Το συμμετρικό θετικά ορισμένο pencil  $A - \lambda B$  έχει πραγματικές ιδιοτιμές και γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα.

*Απόδειξη.* Αφού ο πίνακας  $B$  είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, μπορούμε να

βρούμε την Cholesky παραγοντοποίηση του  $B$ , άρα  $B = LL^T$ . Άρα έχουμε

$$\begin{aligned} Ax &= \lambda Bx \\ Ax &= \lambda LL^T x \\ L^{-1}Ax &= \lambda L^T x \\ L^{-1}A(L^T)^{-1}L^T x &= \lambda L^T x \\ Cy &= \lambda y, \end{aligned}$$

όπου  $C = L^{-1}A(L^T)^{-1}$  και  $y = L^T x$ . Ο πίνακας  $C$  είναι συμμετρικός, άρα η ιδιοτιμή  $\lambda$  είναι πραγματική. Το γεγονός ότι τα ιδιοδιανύσματα είναι γραμμικά ανεξάρτητα είναι προφανές, αφού ένας συμμετρικός πίνακας έχει  $n$  το πλήθος γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα.  $\square$

**Ορισμός 5.1.2.** Αν το  $x$  είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του συμμετρικού θετικά ορισμένου pencil  $(A, B)$  που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή  $\lambda$ , τότε ο αριθμός

$$v = \frac{\|x\|_2}{\sqrt{(x^*Ax)^2 + (x^*Bx)^2}}$$

είναι ο δείκτης κατάστασης της ιδιοτιμής  $\lambda$ .

## 5.2 Ο αλγόριθμος QZ για το συμμετρικό θετικά ορισμένο πρόβλημα ιδιοτιμών

Ο αλγόριθμος QZ για το κανονικό pencil μπορεί φυσικά να εφαρμοστεί στο συμμετρικό θετικά ορισμένο πρόβλημα ιδιοτιμών. Όμως, θα ήταν προτιμότερο να χρησιμοποιήσουμε μία μέθοδο η οποία θα εκμεταλλεύεται καταλλήλως τις ιδιότητες του θετικά ορισμένου πίνακα καθώς και της συμμετρίας.

## 5.3 Ο αλγόριθμος Cholesky για το συμμετρικό θετικά ορισμένο πρόβλημα ιδιοτιμών

### Αλγόριθμος 5.3.1. Cholesky QR Παραγοντοποίηση για το Συμμετρικό Θετικά Ορισμένο Pencil

#### ΕΙΣΟΔΟΣ

(i) Πίνακας  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  συμμετρικός. (ii) Πίνακας  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$  συμμετρικός και θετικά ορισμένος.

#### ΕΞΟΔΟΣ

Οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του pencil  $A - \lambda B$ .

1. Εύρεση της παραγοντοποίησης Cholesky του πίνακα  $B$ :  $B = LL^T$ .
2. Σχηματισμός του  $C = L^{-1}A(L^T)^{-1}$  εκμεταλλευόμενοι τη συμμετρία του πίνακα  $A$ .
3. Υπολογισμός των ιδιοτιμών  $\lambda_i$  και των ιδιοδιανυσμάτων  $y_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  του συμμετρικού πίνακα  $C$  χρησιμοποιώντας QR iteration με single-shift για συμμετρικούς πίνακες. (Οι ιδιοτιμές του pencil  $A - \lambda B$  ταυτίζονται με τις ιδιοτιμές του  $C$ ).
4. Υπολογισμός των γενικευμένων ιδιοδιανυσμάτων  $x_i$  του pencil  $A - \lambda B$ , λύνοντας το σύστημα  $L^T x_i = y_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ .

#### 5.4 Διαγωνοποίηση του συμμετρικού θετικά ορισμένου προβλήματος ιδιοτιμών

Ο αλγόριθμος Cholesky QR iteration του συμμετρικού θετικά ορισμένου pencil μας δίνει μια μέθοδο εύρεσης του μη ιδιάζοντος πίνακα  $P$ , ο οποίος μετασχηματίζει ταυτόχρονα τους πίνακες  $A$  και  $B$  σε διαγώνιους. Πράγματι, έστω  $Q$  ορθογώνιος πίνακας τέτοιος ώστε

$$Q^T C Q = \text{diag}(c_1, c_2, \dots, c_n).$$

Θέτω  $P = (L^{-1})^T Q$ . Τότε

$$P^T A P = Q^T L^{-1} A (L^{-1})^T Q = Q^T C Q = \text{diag}(c_1, c_2, \dots, c_n)$$

και αφού  $B = LL^T$ , έχουμε

$$P^T B P = Q^T L^{-1} B (L^{-1})^T Q = Q^T L^{-1} L L^T (L^{-1})^T Q = I.$$

##### Αλγόριθμος 5.4.1. Ταυτόχρονη Διαγωνοποίηση του Συμμετρικού Θετικά Ορισμένου Pencil

###### ΕΙΣΟΔΟΣ

Ένα συμμετρικό θετικά ορισμένο pencil  $(A, B)$ :  $A = A^T$  και  $B = B^T > 0$ .

###### ΕΞΟΔΟΣ

Ο μη ιδιάζων πίνακας  $P$ , έτσι ώστε να ισχύει  $P^T B P = I$  και  $P^T A P$  διαγώνιος.

1. Εύρεση της παραγοντοποίησης Cholesky του πίνακα  $B$ :  $B = LL^T$ .
2. Σχηματισμός του  $C = L^{-1}A(L^T)^{-1}$  εκμεταλλευόμενοι τη συμμετρία του πίνακα  $A$  (ο  $C$  είναι συμμετρικός).

3. Εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο QR iteration για συμμετρικούς πίνακες στον  $C$ , βρίσκουμε ορθογώνιο πίνακα  $Q$ , έτσι ώστε ο  $Q^T C Q$  να είναι διαγώνιος.
4. Σχηματισμός του  $P = (L^{-1})^T Q$ .

**Πολυπλοκότητα**

$14n^3$  flops.

## 5.5 Ο αλγόριθμος Lanczos για το συμμετρικό θετικά ορισμένο πρόβλημα ιδιοτιμών

Έστω ότι ο πίνακας  $B$  είναι καλής κατάστασης και έστω  $B = LL^T$  η Cholesky παραγοντοποίησή του. Τότε το γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών  $Ax = \lambda Bx$  μετατρέπεται στο κανονικό πρόβλημα

$$(L^{-1}A(L^T)^{-1})\tilde{x} = \lambda\tilde{x},$$

όπου  $\tilde{x} = L^T x$ . Ο συμμετρικός αλγόριθμος Lanczos μπορεί να εφαρμοστεί στο συμμετρικό πίνακα  $L^{-1}A(L^T)^{-1}$ . Το γινόμενο

$$r = L^{-1}A(L^T)^{-1}y,$$

που είναι αναγκαίο για τη λειτουργία του αλγορίθμου, μπορεί να υπολογιστεί χωρίς τον άμεσο υπολογισμό του πίνακα  $L^{-1}A(L^T)^{-1}$  ως εξής:

- (i) Λύνουμε ως προς  $u$  το  $L^T u = y$ .
- (ii) Θέτουμε  $w = Au$ .
- (iii) Λύνουμε ως προς  $r$  το  $Lr = w$ .

## 5.6 Ο αλγόριθμος MDR

### 5.6α' Εισαγωγή

Έστω το γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών

$$Ax = \lambda Bx,$$

όπου οι  $A$  και  $B$  είναι πραγματικοί συμμετρικοί  $n \times n$  πίνακες και ο  $B$  είναι θετικά ορισμένος. Η πιο γνωστή μέθοδος επίλυσης του προβλήματος είναι η παραγοντοποίηση Cholesky. Όμως, αν ο  $B$  είναι σχεδόν ιδιάζων, οι ιδιοτιμές δε θα μπορούν να καθοριστούν στα πλαίσια της ανοχής του σφάλματος που επιθυμούμε.

Μία άλλη μέθοδος που μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε είναι ο αλγόριθμος QZ. Ξεκινώντας με  $A_0 = A$  και  $B_0 = B$ , κατασκευάζουμε τις ακολουθίες πινάκων

$$A_{i+1} = Q_i^T A_i Z_i, \quad B_{i+1} = Q_i^T B_i Z_i,$$

έτσι ώστε κάθε  $B_{i+1}$  να είναι άνω τριγωνικός, κάθε  $A_{i+1}$  να είναι άνω Hessenberg και, κάτω από κατάλληλες συνθήκες, ο  $A_{i+1}$  να τείνει να γίνει άνω τριγωνικός καθώς  $i \rightarrow \infty$ . Δυστυχώς, οι δύο αυτοί αλγόριθμοι δεν εκμεταλλεύονται τη συμμετρία των  $A$  και  $B$ . Οι πίνακες  $A_{i+1}$  και  $B_{i+1}$  θα είναι ‘γεμάτοι’ άνω Hessenberg και ‘γεμάτοι’ άνω τριγωνικοί, αντί για τριδιαγώνιοι και διαγώνιοι αντίστοιχα.

Ο αλγόριθμος MDR, ξεκινώντας με  $A_0 = A$  και  $B_0 = B$ , κατασκευάζει τις ακολουθίες πινάκων

$$A_{i+1} = M_i^T A_i M_i, \quad B_{i+1} = M_i^T B_i M_i,$$

έτσι ώστε κάθε  $B_{i+1}$  να είναι διαγώνιος, κάθε  $A_{i+1}$  να είναι τριδιαγώνιος για  $i \geq 1$  και, κάτω από κατάλληλες συνθήκες, ο  $A_{i+1}$  να τείνει να γίνει διαγώνιος καθώς  $i \rightarrow \infty$ .

### 5.6β' Αρχική αναγωγή

Έστω το πρόβλημα

$$\tilde{A}x = \lambda Bx,$$

όπου οι  $\tilde{A}$  και  $B$  είναι πραγματικοί συμμετρικοί  $n \times n$  πίνακες και ο  $B$  είναι θετικά ημιορισμένος. Αρχικά, ο πίνακας  $B$  πρέπει να αναχθεί σε ένα διαγώνιο πίνακα  $D_1$ :

$$M_0^T B M_0 = D_1 = \text{diag}(d_1, \dots, d_n),$$

ενώ αντίστοιχα ο  $\tilde{A}$  πρέπει να μετασχηματιστεί στον

$$M_0^T \tilde{A} M_0 = A,$$

έτσι ώστε ο  $M_0$  να είναι μη ιδιάζων. Κάτι τέτοιο μπορεί να υλοποιηθεί με κάποια παραγοντοποίηση Cholesky του  $B$  με κατάλληλη οδήγηση.

Για τους υπολογισμούς χρησιμοποιήθηκε η παρακάτω διαδικασία: Οι μη διαγώνιες εισόδοι του πίνακα  $B$  στην  $k$  γραμμή και  $k$  στήλη μηδενίστηκαν από τον αλγόριθμο του Gauss για  $k = n, \dots, 2$ . Σε κάθε βήμα, το μεγαλύτερο διαγώνιο στοιχείο του εναπομείναντα πίνακα διαλέγεται σαν οδηγό στοιχείο. Στην πράξη, η διαδικασία αυτή τοποθετεί τα διαγώνια στοιχεία  $d_i$  του πίνακα  $D_1$  σε αύξουσα σειρά, δηλαδή τα μικρότερα στοιχεία θα είναι στις πρώτες θέσεις του πίνακα.

Έχουμε τώρα μετατρέψει το πρόβλημα μας στο εξής πρόβλημα:

$$Ay = \lambda Dy,$$

όπου  $A$  συμμετρικός και  $D$  διαγώνιος με μη αρνητικές εισόδους. Σκοπός μας είναι να διαγωνοποιήσουμε τον  $A$  και  $D$  ταυτόχρονα.

Αν ο  $D$  είναι ιδιάζων, δεν υπάρχει πάντα μη ιδιάζων πίνακας  $M$  ώστε οι πίνακες  $M^T AM$  και  $M^T DM$  να είναι διαγώνιοι. Το επόμενο θεώρημα εξασφαλίζει μία ικανή και αναγκαία συνθήκη ύπαρξης του πίνακα  $M$ , που διαγωνοποιεί ταυτόχρονα τους  $A$  και  $D$ .

**Θεώρημα 5.6.1.** Για

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_s \end{pmatrix},$$

όπου  $0 < s < n$  και αντίστοιχα διαχωρισμένο πίνακα

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^T & A_{22} \end{pmatrix},$$

όπου  $A$  συμμετρικός, τα ακόλουθα είναι ισοδύναμα:

(i)  $\text{rank} \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{12}^T \end{pmatrix} = \text{rank } A_{11}.$

(ii) Υπάρχει μη ιδιάζων πίνακας  $M$ , τέτοιος ώστε οι  $M^T AM$  και  $M^T DM$  να είναι διαγώνιοι.

*Απόδειξη.* Για τον πίνακα  $M$ , χωρίς βλάβη της γενικότητας, υποθέτουμε από το (ii) ότι

$$M^T DM = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_s \end{pmatrix}.$$

Αν ο

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}$$

είναι διαχωρισμένος αντίστοιχα, έχουμε ότι  $M_{22}^T M_{22} = I_s$  και  $M_{21}^T M_{21} = 0$ , δηλαδή  $M_{22}$  ορθογώνιος,  $M_{21} = 0$  και  $M_{11}$  μη ιδιάζων, γιατί ο  $M$  είναι μη ιδιάζων. Άρα

$$M^T AM = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{12}^T & C_{22} \end{pmatrix},$$

όπου  $C_{12}^T = M_{12}^T A_{11} M_{11} + M_{22}^T A_{12}^T M_{11}$ . Αν ο  $M^T AM$  είναι διαγώνιος, τότε  $C_{12}^T = 0$ , δηλαδή

$$0 = M_{12}^T A_{11} M_{11} + M_{22}^T A_{12}^T M_{11}$$

και άρα, από τα προηγούμενα, συμπεραίνουμε ότι

$$0 = M_{22} M_{12}^T A_{11} + A_{12}^T,$$

που σημαίνει ότι  $\text{rank} \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{12}^T \end{pmatrix} = \text{rank } A_{11}.$



Αντιστρόφως, αν  $\text{rank} \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{12}^T \end{pmatrix} = \text{rank } A_{11}$ , τότε υπάρχει πίνακας  $W$ , για τον οποίο ισχύει ότι

$$A_{12}^T + W A_{11} = 0.$$

Υπάρχουν, επίσης, ορθογώνιοι πίνακες  $M_{11}$  και  $M_{22}$ , έτσι ώστε ο  $M_{11}^T A_{11} M_{11} = C_{11}$  να είναι διαγώνιος και ο  $M_{22}^T [A_{22} + W A_{12} + A_{12}^T W^T + W A_{11} W^T] M_{22} = C_{22}$  να είναι διαγώνιος. Αν, επιπλέον, ορίσουμε  $M_{12} = W^T M_{22}$ , τότε ο πίνακας

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ 0 & M_{22} \end{pmatrix}$$

διαγωνοποιεί ταυτόχρονα τους  $A$  και  $D$ . □

Έτσι, χωρίς βλάβη της γενικότητας, μπορούμε να υποθέσουμε ότι

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & D_s \end{pmatrix},$$

όπου  $D_s$  είναι  $s \times s$  διαγώνιος πίνακας με θετικά στοιχεία. Αν  $s = 0$  ή  $s = n$ , τότε σε κάθε περίπτωση, οι  $A$  και  $D$  διαγωνοποιούνται ταυτόχρονα. Για  $0 < s < n$ , από το προηγούμενο θεώρημα, αν το  $s \times s$  κυρίαρχο μικρότερο κομμάτι του πίνακα  $A$  είναι μη μηδενικό, τότε υπάρχει πίνακας

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ 0 & M_{22} \end{pmatrix},$$

ο οποίος διαγωνοποιεί τους  $A$  και  $D$  ταυτόχρονα. Σε αυτή την περίπτωση, το πρόβλημα έχει  $s$  άπειρες και  $n - s$  πεπερασμένες ιδιοτιμές.

### 5.6γ' Αναγωγή MDR

Θέλουμε να μετατρέψουμε το πρόβλημα  $Ay = \lambda Dy$  με πίνακες που μηδενίζουν συγκεκριμένα στοιχεία του  $A$  και δεν καταστρέφουν τη διαγώνια μορφή του πίνακα  $D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$ . Το πρόβλημα μηδενισμού του  $(j, i)$  στοιχείου του  $A$ ,  $j \neq i$ , είναι δύο διαστάσεων. Άρα πρέπει να λύσουμε το:

**Βασικό πρόβλημα μηδενισμού.** Έστω

$$\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_{ii} \\ \alpha_{ji} \end{pmatrix}, \quad \alpha_{ji} \neq 0, \quad D = \begin{pmatrix} d_i & 0 \\ 0 & d_j \end{pmatrix} \geq 0.$$

Πρέπει να βρούμε μη ιδιάζων πίνακα  $M$ , για τον οποίο ισχύει ότι

$$M^T \alpha = \begin{pmatrix} k \\ 0 \end{pmatrix}, \quad k > 0, \quad M^T D M = \begin{pmatrix} c_i & 0 \\ 0 & c_j \end{pmatrix}$$

και ο δείκτης κατάστασης  $\text{Cond}_2(M) = \|M\|_2 \|M^{-1}\|_2$  να είναι όσο το δυνατόν μικρότερος. Διαχρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

(i)  $\alpha_{ii} = 0$ . Η απλούστερη λύση είναι τότε η

$$M^T = \text{sign}(\alpha_{ji}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

όπου  $k = |\alpha_{ji}|$ ,  $c_i = d_j$ ,  $c_j = d_i$  και  $\text{Cond}_2(M) = 1$ .

(ii)  $\alpha_{ii} \neq 0$ ,  $d_i = d_j = 0$ . Το πρόβλημα τότε λύνεται από τον ορθογώνιο πίνακα

$$M^T = \frac{1}{\|\alpha\|_2} \begin{pmatrix} \alpha_{ii} & \alpha_{ji} \\ -\alpha_{ji} & \alpha_{ii} \end{pmatrix}.$$

Τότε  $k = \|\alpha\|_2$ ,  $c_i = c_j = 0$  και  $\text{Cond}_2(M) = 1$ .

(iii)  $\alpha_{ii} \neq 0$ ,  $d_i + d_j \neq 0$ . Έχουμε τη λύση

$$M^T = \begin{pmatrix} \frac{b_{ii}}{\|b\|_2} & \frac{b_{ji}}{\|b\|_2} \\ -\frac{\alpha_{ji}}{\|\alpha\|_2} & \frac{\alpha_{ii}}{\|\alpha\|_2} \end{pmatrix}, \quad \text{όπου } b = \begin{pmatrix} b_{ii} \\ b_{ji} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_j \alpha_{ii} \\ d_i \alpha_{ji} \end{pmatrix}.$$

Τότε  $k = \frac{(b, \alpha)}{\|b\|_2}$ , όπου  $0 < k \leq \|\alpha\|_2$  και  $(\cdot, \cdot)$  το κανονικό εσωτερικό γινόμενο,

$$c_i = d_i d_j \frac{(b, \alpha)}{\|b\|_2^2} \left( = \frac{d_i b_{ii}^2}{\|b\|_2^2} + \frac{d_j b_{ji}^2}{\|b\|_2^2} \right),$$

$$c_j = \frac{(b, \alpha)}{\|\alpha\|_2^2} \left( = \frac{d_i \alpha_{ji}^2}{\|\alpha\|_2^2} + \frac{d_j \alpha_{ii}^2}{\|\alpha\|_2^2} \right)$$

και

$$\min\{d_i, d_j\} \leq c_l \leq \max\{d_i, d_j\} \quad \text{για } l \in \{i, j\}.$$

(Αν  $d_i = d_j$  τότε  $c_i = c_j$  και ο  $M$  είναι ορθογώνιος). Επιπλέον, βρίσκουμε ότι

$$1 \leq \|M\|_2 = \sqrt{1 + \alpha} \leq \sqrt{2}$$

και

$$1 \leq \|M^{-1}\|_2 = \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha}},$$

όπου

$$\alpha = \left| \frac{\alpha_{ii} \alpha_{ji} (d_i - d_j)}{\|b\|_2 \|\alpha\|_2} \right| < 1.$$

Οι συνθήκες  $M^T \alpha = \begin{pmatrix} k \\ 0 \end{pmatrix}$  και  $M^T D M = \begin{pmatrix} c_i & 0 \\ 0 & c_j \end{pmatrix}$  καθορίζουν τον  $M^T$  μοναδικά και δίνουν το μικρότερο δείκτη κατάστασης ως προς τη  $\|\cdot\|_2$ . Για  $i < j$ , το  $(j, i)$  στοιχείο του πίνακα  $A$  μηδενίζεται πολλαπλασιάζοντας από αριστερά με τον πίνακα

$$M_{j,i}^T = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & m_{ii} & 0 & \cdots & 0 & m_{ij} \\ & & & 0 & 1 & & & 0 \\ & & & \vdots & & \ddots & & \vdots \\ & & & 0 & & & 1 & 0 \\ & & & m_{ji} & 0 & \cdots & 0 & m_{jj} \\ & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix},$$

όπου

$$M^T = \begin{pmatrix} m_{ii} & m_{ij} \\ m_{ji} & m_{jj} \end{pmatrix}$$

είναι η λύση του βασικού προβλήματος μηδενισμού για τους πίνακες

$$\begin{pmatrix} \alpha_{ii} \\ \alpha_{ji} \end{pmatrix} \quad \text{και} \quad \begin{pmatrix} d_i & 0 \\ 0 & d_j \end{pmatrix}.$$

Τα στοιχεία  $d_i$  και  $d_j$  του διαγώνιου πίνακα  $D$  πρέπει να αντικατασταθούν από τα  $c_i$  και  $c_j$  αντίστοιχα.

Με αυτούς τους πίνακες μπορούμε να δημιουργήσουμε μια συγκεκριμένη αναγωγή, όπως περιγράφεται στο ακόλουθο λήμμα.

**Λήμμα 5.6.2.** Έστω  $D$  δοσμένος μη αρνητικός διαγώνιος πίνακας διάστασης  $n$ . Για κάθε  $n \times n$  πραγματικό πίνακα  $A$  υπάρχει ένας μη ιδιάζων πίνακας  $M$ , τέτοιος ώστε

- (i)  $M^T A = R$  να είναι άνω τριγωνικός πίνακας με μη αρνητικά διαγώνια στοιχεία,
- (ii)  $M^T D M = C$  να είναι διαγώνιος πίνακας,
- (iii) αν οι  $P, Q$  είναι μεταθετικοί πίνακες για τους οποίους ισχύει

$$P D P^T = \left( \begin{array}{ccc|c} 0 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 0 & \\ \hline & & & \tilde{D} \end{array} \right) \quad \text{και} \quad Q C Q^T = \left( \begin{array}{ccc|c} 0 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 0 & \\ \hline & & & \tilde{C} \end{array} \right),$$

όπου  $\tilde{D}$  και  $\tilde{C}$  είναι μη ιδιάζοντες, τότε έχουμε τον αντίστοιχο διαχωρισμό

$$PMQ^T = \left( \begin{array}{c|c} M_{11} & M_{12} \\ \hline 0 & M_{22} \end{array} \right)$$

και ο  $M_{11}$  είναι ορθογώνιος.

Αν ο  $D$  έχει μόνο θετικά διαγώνια στοιχεία και ο  $A$  είναι μη ιδιάζων, τότε οι πίνακες  $M$  και  $R$  είναι μοναδικά ορισμένοι (δηλαδή, αν  $N$  και  $S$  είναι άλλοι πίνακες για τους οποίους ισχύουν οι πρώτες δύο συνθήκες, τότε υπάρχει διαγώνιος πίνακας  $J$ , με θετικά διαγώνια στοιχεία, για τον οποίο ισχύει ότι  $N = MJ$  και  $S = JR$ ).

### 5.6δ' Αλγόριθμος MDR

#### Βασική μορφή

Έστω  $D$  δοσμένος μη αρνητικός διαγώνιος πίνακας και  $A$  πραγματικός τετραγωνικός πίνακας. Ορίζουμε

$$A_1 = A \quad \text{και} \quad D_1 = D.$$

Για  $i = 1, 2, \dots$  βρίσκουμε την  $MD_iR$  αναγωγή του  $A_i$ :

$$M_i^T A_i = R_i, \quad \text{όπου} \quad M_i^T D_i M_i = D_{i+1},$$

και υπολογίζουμε

$$A_{i+1} = R_i M_i.$$

**Ιδιότητες 5.6.3.** (i) Αν ο πίνακας  $A$  είναι άνω Hessenberg, τότε όλοι οι πίνακες  $A_i$ ,  $i = 2, 3, \dots$ , είναι άνω Hessenberg.

(ii) Αν ο πίνακας  $A$  είναι συμμετρικός, τότε όλοι οι πίνακες  $A_i$ ,  $i = 2, 3, \dots$ , είναι συμμετρικοί.

(iii) Αν ο πίνακας  $D$  είναι πολλαπλάσιο του μοναδιαίου πίνακα, τότε ο αλγόριθμος MDR ανάγεται στον αλγόριθμο QR, δηλαδή αν  $A_1 = A$  υπολογίζουμε για  $i = 1, 2, \dots$  την QR παραγοντοποίηση

$$A_i = Q_i R_i \quad \text{και} \quad A_{i+1} = R_i Q_i.$$

**Λήμμα 5.6.4.** Έστω ότι ο διαγώνιος πίνακας  $D$  έχει μόνο θετικά στοιχεία, έστω ότι ο πίνακας  $A$  είναι μη ιδιάζων, και έστω  $\{A_i\}$  και  $\{D_i\}$  οι ακολουθίες πινάκων που παράγει ο αλγόριθμος MDR για τους πίνακες  $A$  και  $D$  αντίστοιχα. Αν  $\{C_i\}$  η ακολουθία που παράγει ο αλγόριθμος QR με  $C_1 = D^{-1/2} A D^{-1/2}$ , τότε η σχέση

$$A_{i+1} = D_{i+1}^{1/2} C_{i+1} D_{i+1}^{1/2}$$

ισχύει για κάθε  $i \in \mathbb{N}$ . Η σχέση αυτή χρησιμοποιείται για να αποδειχθεί ότι ο αλγόριθμος MDR, κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες, συγκλίνει.

**Θεώρημα 5.6.5 (Σύγκλιση του MDR).** Έστω  $D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$  μη αρνητικός διαγώνιος πίνακας, για τον οποίο ισχύει ότι  $d_1 = d_2 = \dots = d_k = 0$  και  $d_{k+1}d_{k+2} \dots d_n \neq 0$ . Έστω ότι ο  $k \times k$  κυρίαρχος υποπίνακας του  $n \times n$  πίνακα  $A$  έχει ιδιοτιμές  $|\alpha_1| > |\alpha_2| > \dots > |\alpha_k| > 0$ . Αν για τις  $n - k$  πεπερασμένες ιδιοτιμές  $\lambda_{k+1}, \dots, \lambda_n$  του προβλήματος  $Ax = \lambda Dx$  έχουμε ότι  $|\lambda_{k+1}| > |\lambda_{k+2}| > \dots > |\lambda_n| > 0$ , τότε υπό τις συνθήκες (\*) και (\*\*) που δίνονται παρακάτω, ο πίνακας  $A_{i+1}$  τείνει να γίνει άνω τριγωνικός και για το  $s$  στοιχείο  $\alpha_{ss}^{(i)}$  του  $A_i$  και το  $s$  στοιχείο  $d_s^{(i)}$  του  $D_i$  ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις:

$$(i) \lim_{i \rightarrow \infty} \alpha_{ss}^{(i)} = \alpha_s \text{ για } s \in \{1, \dots, k\},$$

$$(ii) \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{\alpha_{ss}^{(i)}}{d_s^{(i)}} = \lambda_s \text{ για } s \in \{k+1, \dots, n\}.$$

*Απόδειξη.* Καταρχήν, το πρόβλημα  $Ax = \lambda Dx$  έχει  $k$  άπειρες και  $n - k$  πεπερασμένες ιδιοτιμές, καθώς το πρώτο  $k \times k$  μικρότερο κομμάτι του πίνακα  $A$  είναι μη μηδενικό.

Για  $A_1 = A$  και  $D_1 = D$ , υπολογίζουμε την  $MD_1R$  αναγωγή του  $A_1$ :

$$M_1^T A_1 = R_1 \quad \text{και} \quad D_2 = M_1^T D_1 M_1.$$

Παρατηρώντας την αναγωγή, αφού ο  $k \times k$  κυρίαρχος υποπίνακας  $A_{11}^{(1)}$  του  $A_1$  είναι μη ιδιάζων, τα μηδενικά διαγώνια στοιχεία του πίνακα  $D_2$  βρίσκονται στην αρχή του πίνακα, και σύμφωνα με προηγούμενο λήμμα έχουμε

$$M_1 = \begin{pmatrix} M_{11}^{(1)} & M_{12}^{(1)} \\ 0 & M_{22}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \text{όπου ο } M_{11}^{(1)} \text{ είναι ορθογώνιος.}$$

Άρα ο  $A_2 = R_1 M_1$  είναι block άνω τριγωνικός, δηλαδή

$$A_2 = \begin{pmatrix} A_{11}^{(2)} & A_{12}^{(2)} \\ 0 & A_{22}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad \text{όπου } A_{11}^{(2)} = M_{11}^{(1)T} A_{11}^{(1)} M_{11}^{(1)T}.$$

Εύκολα βλέπουμε ότι, από εδώ και πέρα, όλοι οι  $M_i$  είναι block διαγώνιοι πίνακες:

$$M_i = \begin{pmatrix} M_{11}^{(i)} & 0 \\ 0 & M_{22}^{(i)} \end{pmatrix}, \quad \text{όπου ο } M_{11}^{(i)} \text{ είναι ορθογώνιος,}$$

όλοι οι  $A_i$  έχουν την ίδια άνω τριγωνική μορφή με τον  $A_2$ :

$$A_i = \begin{pmatrix} A_{11}^{(i)} & A_{12}^{(i)} \\ 0 & A_{22}^{(i)} \end{pmatrix},$$

και για κάθε  $D_i$ , τα μηδενικά στοιχεία της διαγωνίου βρίσκονται στις  $k$  πρώτες θέσεις:

$$D_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \tilde{D}_i \end{pmatrix}, \quad \text{όπου } \tilde{D}_i \text{ μη ιδιάζων.}$$

Ο αλγόριθμος, τώρα, δρα στα δύο διαγώνια block του  $A_i$ . Συγκεκριμένα, η  $\{A_{11}^{(i+1)}\}$  είναι η ακολουθία που παράγει ο αλγόριθμος QR για τον  $A_{11}^{(1)}$ .

Εξαιτίας των υποθέσεών μας, υπάρχει ένας μη ιδιάζων πίνακας  $X$ , για τον οποίο ισχύει ότι

$$A_{11}^{(1)} = X \operatorname{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_k) X^{-1}.$$

Αν

όλα τα κυρίαρχα μικρότερα κομμάτια του  $X^{-1}$  είναι μη μηδενικά, (\*)

τότε ο αλγόριθμος QR για τον πίνακα  $A_{11}^{(1)}$  συγκλίνει υπό την έννοια ότι ο  $A_{11}^{(i)}$  τείνει να γίνει άνω τριγωνικός και τα διαγώνια στοιχεία συγκλίνουν στα  $\alpha_1, \dots, \alpha_k$  αντίστοιχα. Στα πιο κάτω διαγώνια block του  $A_i$ , ο αλγόριθμος δρα σαν τον MDR αλλά ξεκινώντας με τους  $A_{22}^{(i)}$  και  $\tilde{D}_2$ .

Από προηγούμενο λήμμα γνωρίζουμε ότι για κάθε  $i \geq 2$  ισχύει

$$A_{22}^{(i)} = \tilde{D}_i^{1/2} C_i \tilde{D}_i^{1/2},$$

όπου  $C_i$  είναι οι πίνακες που παράγονται από τον QR, ξεκινώντας από τον  $C_2 = \tilde{D}_2^{-1/2} A_{22}^{(2)} \tilde{D}_2^{-1/2}$ . Για τον πίνακα  $C_2$  υπάρχει ένας μη ιδιάζων πίνακας  $Y$ , για τον οποίο ισχύει ότι

$$C_2 = Y \operatorname{diag}(\lambda_{k+1}, \dots, \lambda_n) Y^{-1}.$$

Αν

όλα τα κυρίαρχα μικρότερα κομμάτια του  $Y^{-1}$  είναι μη μηδενικά, (\*\*)

τότε, όπως πριν, οι πίνακες  $C_i$  τείνουν να γίνουν άνω τριγωνικοί και το  $s$  στοιχείο  $c_{ss}^{(i)}$  συγκλίνει στο  $\lambda_s$ .

Αφού οι  $\tilde{D}_i$  είναι φραγμένοι (έχουμε ότι  $\|\tilde{D}_i\|_2 \leq \|\tilde{D}_2\|_2$  για κάθε  $i \geq 2$ ) βλέπουμε ότι ο  $A_{22}^{(i)}$  τείνει να γίνει άνω τριγωνικός και

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{\alpha_{ss}^{(i)}}{d_s^{(i)}} = \lim_{i \rightarrow \infty} c_{ss}^{(i)} = \lambda_s.$$

□

### Αναγωγή σε τριδιαγώνια μορφή

Στο πρώτο βήμα, ο πίνακας  $A = (\alpha_{ij})$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, n$ , ανάγεται σε συμμετρική τριδιαγώνια μορφή. Για  $i+1 < j$ , το  $(j, i)$  στοιχείο του  $A$  μηδενίζεται πολλαπλασιάζοντας

από αριστερά με τον πίνακα

$$M_{j,i+1}^T = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & m_{i+1,i+1} & 0 & \cdots & 0 & m_{i+1,j} & \\ & & & 0 & 1 & & & 0 & \\ & & & \vdots & & \ddots & & \vdots & \\ & & & 0 & & & 1 & 0 & \\ & & & m_{j,i+1} & 0 & \cdots & 0 & m_{j,j} & \\ & & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix},$$

όπου

$$\begin{pmatrix} m_{i+1,i+1} & m_{i+1,j} \\ m_{j,i+1} & m_{j,j} \end{pmatrix}$$

είναι η λύση του βασικού προβλήματος μηδενισμού για τους πίνακες

$$\begin{pmatrix} \alpha_{i+1,i} \\ \alpha_{j,i} \end{pmatrix} \quad \text{και} \quad \begin{pmatrix} d_{i+1} & 0 \\ 0 & d_j \end{pmatrix},$$

δίνοντας δύο καινούρια διαγώνια στοιχεία,  $c_{i+1}$  και  $c_j$ .

Επειδή ο  $A$  είναι συμμετρικός και η  $j$  στήλη του  $M_{j,i+1}$  είναι το  $e_j$  διάνυσμα, ο πίνακας  $M_{j,i+1}^T A M_{j,i+1}$  έχει μηδενικά στοιχεία στις θέσεις  $(j, i)$  και  $(i, j)$ . Στο διαγώνιο πίνακα  $D$ , το  $(i+1)$  στοιχείο και  $j$  στοιχείο πρέπει να αντικατασταθούν από τα  $c_{i+1}$  και  $c_j$ . Για να ανάγουμε τον  $A$  σε τριδιαγώνια μορφή, τα στοιχεία  $(j, i)$  και  $(i, j)$  πρέπει να μηδενιστούν με τη σειρά

$$(j, i) = (3, 1)(4, 1), \dots, (n, 1)(4, 3), \dots, (n, n-2),$$

όπως περιγράφεται πιο πάνω. Αν ο τριδιαγώνιος πίνακας που προκύπτει είναι μη αναγωγίμος (για παράδειγμα, τα στοιχεία κάτω από την κύρια διαγώνιο είναι όλα μη μηδενικά), τότε ο μετασχηματισμός καθορίζεται μοναδικά σε ένα διαγώνιο πίνακα, διορθώνοντας την πρώτη στήλη του πίνακα μετασχηματισμού.

**Λήμμα 5.6.6.** Έστω  $A$  ένας  $n \times n$  συμμετρικός πίνακας, έστω  $D$  ένας  $n \times n$  διαγώνιος πίνακας με θετικά στοιχεία, έστω  $M, N$   $n \times n$  μη ιδιάζοντες πίνακες, για τους οποίους ισχύουν τα

- (i)  $M^T A M = T$  μη αναγωγίμος τριδιαγώνιος πίνακας,
- (ii)  $N^T A N = \tilde{T}$  τριδιαγώνιος πίνακας,

(iii)  $M^T DM = C$  και  $N^T DN = G$  διαγώνιοι,

και έστω ότι η πρώτη στήλη του  $M$  και η πρώτη στήλη του  $N$  είναι γραμμικά ανεξάρτητες. Τότε υπάρχει ορθογώνιος διαγώνιος πίνακας  $Q$  έτσι ώστε

$$N = MG^{-1/2}Q^T C^{1/2} \quad \text{και} \quad \tilde{T} = C^{1/2}QG^{-1/2}TG^{-1/2}Q^T C^{1/2}.$$

Απόδειξη. Έχουμε ότι  $M^T N^{-T} \tilde{T} N^{-1} M = T$  και  $M^T N^{-T} C N^{-1} M = G$ . Ο πίνακας  $Q = C^{1/2} N^{-1} M G^{-1/2}$  είναι ορθογώνιος πίνακας και η πρώτη στήλη του είναι πολλαπλάσιο του  $e_1$ . Τώρα, ο  $Q$  μετασχηματίζει τον τριδιαγώνιο πίνακα  $C^{-1/2} \tilde{T} C^{-1/2}$  στον μη αναγώγιμο τριδιαγώνιο πίνακα  $G^{1/2} T G^{1/2}$ , και άρα ο  $Q$  πρέπει να είναι ορθογώνιος διαγώνιος πίνακας.  $\square$

Το αρχικό πρόβλημα έχει μετασχηματιστεί τώρα στο πρόβλημα

$$T_1 z = \lambda D_1 z,$$

όπου  $T_1$  συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας και ο  $D_1$  είναι διαγώνιος πίνακας με θετικά στοιχεία. Μπορούμε να υποθέσουμε ότι ο  $T_1$  είναι μη αναγώγιμος, γιατί αν ήταν, θα μπορούσαμε να χωρίσουμε το πρόβλημά μας σε προβλήματα μικρότερων διαστάσεων.

### Explicit shifted MDR

Έστω δοσμένοι πίνακες  $T_1$  και  $D_1$  όπως ορίστηκαν παραπάνω. Για  $i = 1, 2, \dots$ , βρίσκουμε, για δοσμένο πραγματικό αριθμό  $k_i$ , την  $M D_i R$  αναγωγή του πίνακα  $T_i - k_i D_i$ :

$$M_i^T (T_i - k_i D_i) = R_i, \quad \text{όπου} \quad M_i^T D_i M_i = D_{i+1},$$

και υπολογίζουμε

$$T_{i+1} = R_i M_i + k_i D_{i+1}.$$

Η σχέση μεταξύ των  $T_i$  και των  $C_i$ , που είναι οι πίνακες που παράγει ο αλγόριθμος QR με  $C_1 = D_1^{-1/2} T_1 D_1^{-1/2}$ , είναι

$$T_i = D_i^{1/2} C_i D_i^{1/2},$$

όπως είδαμε σε προηγούμενο λήμμα. Αν

$$T_i = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

και

$$D_i = \text{diag}(d_1, \dots, d_n),$$



τότε η πιο απλή επιλογή του  $k_i$  θα ήταν  $k_i = \frac{\alpha_n}{d_n}$ . Για πιο ακριβείς υπολογισμούς χρησιμοποιούμε το

$$k_i = \frac{\gamma}{d_n},$$

όπου

$$\gamma = \alpha_n - \frac{\text{sign}(\delta)\beta_{n-1}^2 d_n}{|\delta| + \sqrt{\delta^2 + \beta_{n-1}^2 d_n d_{n-1}}}$$

και

$$\delta = \frac{d_n \alpha_{n-1} - d_n \alpha_n}{2}.$$

Αυτό είναι το Wilkinson-shift για τον  $D_i^{-1/2} T_i D_i^{-1/2}$  και μπορεί ναδειχθεί ότι ο αλγόριθμος συγκλίνει πάντα.

Στο βήμα  $i$  του explicit shifted MDR αλγόριθμου, ο τριδιαγώνιος  $T_i$  μετασχηματίζεται στον τριδιαγώνιο  $T_{i+1} = M_i^T T_i M_i$ . Σύμφωνα με προηγούμενο λήμμα, ο μετασχηματισμός αυτός είναι μοναδικά ορισμένος από την πρώτη στήλη του  $M_i$ . Άρα μπορούμε να υλοποιήσουμε τον αλγόριθμο με implicit shift.

### Implicit shifted MDR

Έστω δοσμένοι πίνακες  $T_1$  και  $D_1$  όπως ορίστηκαν παραπάνω. Για  $i = 1, 2, \dots$ , υπολογίζουμε, για δοσμένο πραγματικό αριθμό  $k_i$ , την πρώτη στήλη  $\alpha$  του πίνακα  $T_i - k_i D_i$ . Βρίσκουμε  $M_i^{(1)}$ , έτσι ώστε να ισχύει ότι  $M_i^{(1)T} \alpha = c e_1$  και ο  $M_i^{(1)T} D_i M_i^{(1)} = D_{i+1}^{(1)}$  να είναι διαγώνιος, λύνοντας το βασικό πρόβλημα μηδενισμού για τα δύο μη μηδενικά στοιχεία του  $\alpha$ . Υπολογίζουμε τον  $M_i^{(1)T} T_i M_i^{(1)}$  και τον ανάγουμε σε τριδιαγώνιο μορφή σχετικά με τον  $D_{i+1}^{(1)}$ , όπως περιγράφηκε παραπάνω.

Μπορεί να αποδειχθεί ότι οι πίνακες  $\tilde{T}_i$  και  $\tilde{D}_i$  που παράγονται από τον explicit shifted MDR διαφέρουν από τους αντίστοιχους πίνακες  $T_i$  και  $D_i$  που παράγονται από τον implicit shifted MDR κατά μία διαγώνιο  $\Lambda_i$ , δηλαδή

$$\tilde{T}_i = \Lambda_i T_i \Lambda_i \quad \text{και} \quad \tilde{D}_i = \Lambda_i D_i \Lambda_i$$

για κάθε  $i$  και οι  $\Lambda_i$  και  $\Lambda_i^{-1}$  είναι φραγμένοι.



# Βιβλιογραφία

- [1] A. Bunse-Cerstner : *An Algorithm for the Symmetric Generalized Eigenvalue Problem*, pages 43–68. Elsevier Science Publishing, 1984.
- [2] Ακρίβης Γ. Δ., Δουγαλής Β. : *Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση*. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2011.
- [3] Alfio Quarteroni, Riccardo Sacco, Fausto Saleri : *Numerical Mathematics*. Springer, 2000.
- [4] Beresford N. Parlett : *The Symmetric Eigenvalue Problem*. Siam, 1998.
- [5] Biswa Nath Datta : *Numerical Linear Algebra and Applications*. Siam, 2010.
- [6] D. C. Dzen, W. W. Lin : *HMDR and FMDR Algorithms for the Generalized Eigenvalue Problem*, pages 169–187. Elsevier Science Publishing, 1989.
- [7] Daniel Kressner : *Numerical Methods for General and Structured Eigenvalue Problems*. Springer, 2005.
- [8] G. W. Stewart : *Matrix Algorithms Volume I: Basic Decompositions*. Siam, 1998.
- [9] G. W. Stewart : *Matrix Algorithms Volume II: Eigensystems*. Siam, 2001.
- [10] Gene H. Golub, Charles F. Van Loan : *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, 1996.
- [11] J. H. Wilkinson : *Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford University Press, 1988.
- [12] James W. Demmel : *Applied Numerical Linear Algebra*. Siam, 1996.
- [13] Lloyd N. Trefethen, David Bau, III : *Numerical Linear Algebra*. Siam, 1997.
- [14] Μαριλένα Μητρούλη : *Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα*. Σημειώσεις Παραδόσεων, 2004.
- [15] Richard L. Burden, J. Douglas Faires : *Numerical Analysis*. Cengage Learning, 2011.

- [16] Steffen Börm, Christian Mehl : *Numerical Methods for Eigenvalue Problems*. De Gruyter, 2012.
- [17] Thomas S. Shores : *Applied Linear Algebra and Matrix Analysis*. Springer, 2000.
- [18] Yousef Saad : *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*. Siam, 2011.