Lineární algebra III – 9. přednáška 6.1.2014

Výpočet vlastních čísel symetrických matic

Symetrické matice mají několik specifických vlastností, které umožnují zrychlit výpočet vlastních čísel:

→ Všechna vlastní čísla jsou reálná, i vl. vektory. (Nemusíme počítat tedy v $\mathbb{C}$, je to efektivnější.)

→ Existuje spektrální rozklad $A = Q\Lambda Q^*$, který lze numericky spočítat, narozdíl od obecné diagonalizace.

→ Ortogonální redukce do Hessenbergova tvaru vytvoří tridiagonální matici $A = QTQ^*$,

kde $T = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & \\ b_1 & a_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ & & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix}$.

Cena redukce .... $\frac{4}{3}n^3$.
Stačí tedy umět najít vlastní čísla tridiagonálních symetrických matic.

→ Teorie perturbace může využít vlastností jako Rayleho kvocienty a Courant–Fisherovy věty. Tedy odhady, jak moc se vlastní čísla $A+E$ liší od A pro malou $\|E\|$, jsou přesnější.

→ Efektivita metod se liší podle situace:
Chceme najít jen vlastní čísla (nebo jen některá)?
Chceme také najít vlastní vektory?

QR metoda pro symetrické matice:

Lze implementovat efektivněji pro tridiagonální matice.
Cena $O(n^2)$ pro vlastní čísla, $6n^3$ pro vlastní vektory.

Metoda rozděl a panuj:

Založená na překvapivé myšlence, kdy matici T rozdělíme na součet dvou. Obecně se vlastní čísla součtu hodně liší, ale tento specifický rozklad dokážeme přepočítat.

$$T = \left(\begin{array}{cccc|cccc} a_1 & b_1 & & & & & & \\ b_1 & a_2 & \ddots & & & & & \\ & \ddots & \ddots & b_{m-1} & & & & \\ & & b_{m-1} & a_m & b_m & & & \\ \hline & & & b_m & a_{m+1} & b_{m+1} & & \\ & & & & b_{m+1} & \ddots & \ddots & \\ & & & & & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & & & b_{n-1} & a_n \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cccc|cccc} a_1 & b_1 & & & & & & \\ b_1 & a_2 & \ddots & & & & O & \\ & \ddots & \ddots & b_{m-1} & & & & \\ & & b_{m-1} & a_m - b_m & & & & \\ \hline & & & & a_{m+1} - b_m & b_{m+1} & & \\ & O & & & b_{m+1} & \ddots & \ddots & \\ & & & & & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & & & b_{n-1} & a_n \end{array}\right) +$$

odečteno $4\times b_m$

matice ranku jedna

$$\left(\begin{array}{cc|cc} & & & \\ & b_m & b_m & \\ \hline & b_m & b_m & \\ & & & \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} T_1 & \\ \hline & T_2 \end{array}\right) + b_m \cdot v v^T,$$

kde $v = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$

Nyní rekurzivně spočteme spektrální rozklady $T_1 = Q_1 \Lambda_1 Q_1^T$ a $T_2 = Q_2 \Lambda_2 Q_2^T$. Potom

$$T = \begin{pmatrix} Q_1 & \\ & Q_2 \end{pmatrix} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \Lambda_1 & \\ & \Lambda_2 \end{pmatrix}}_{=D} \cdot \begin{pmatrix} Q_1 & \\ & Q_2 \end{pmatrix}^T + b_m v v^T =$$

$$\begin{pmatrix} Q_1 & \\ & Q_2 \end{pmatrix} \cdot \left(\begin{pmatrix} \Lambda_1 & \\ & \Lambda_2 \end{pmatrix} + b_m u u^T \right) \cdot \begin{pmatrix} Q_1 & \\ & Q_2 \end{pmatrix}^T,$$

kde platí

$$u = \begin{pmatrix} Q_1^T & \\ & Q_2^T \end{pmatrix} \cdot v,$$

tedy u je tvořeno posl. sloupcem Q_1^T a první sloupcem Q_2^T.

Musíme tedy určit vlastní čísla $D + \rho u u^T$, což je rank 1 modifikace diagonální matice.

Předpokládejme, že λ je vlastní číslo $D + \rho u u^T$ a není pro D. Potom $D - \lambda I$ je regulární a

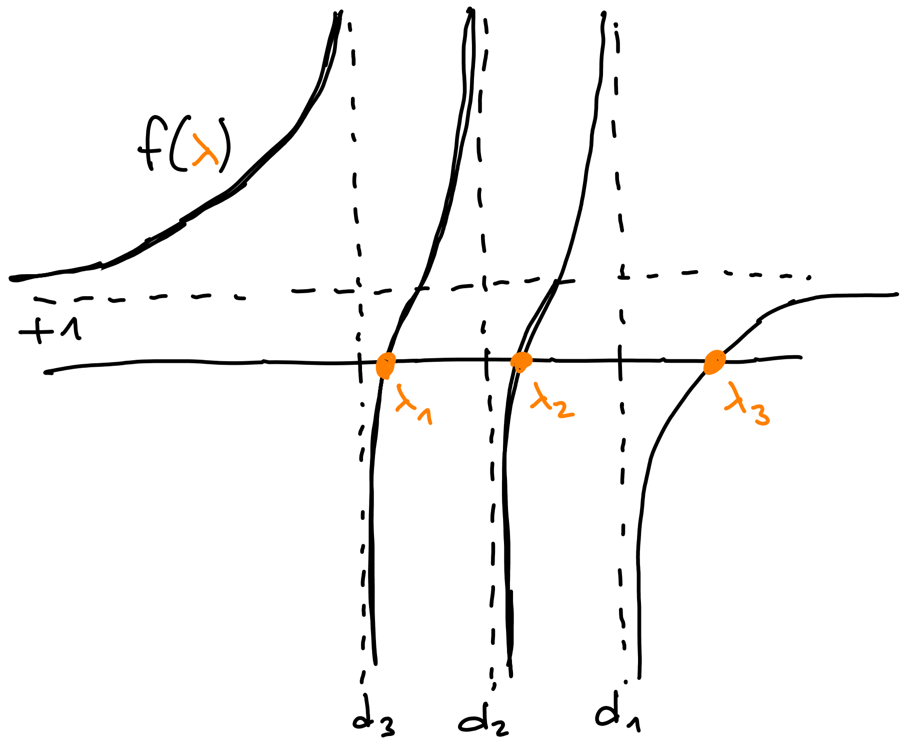
$$0 = \det(D + \rho u u^T - \lambda I) = \underbrace{\det(D - \lambda I)}_{\neq 0} \cdot \underbrace{\det(I + \rho \cdot (D - \lambda I)^{-1} u u^T)}_{= 0}.$$

Užitečné lemma: $\det(I + x y^T) = 1 + y^T x$. Důkaz jako cvičení.

Tedy hledáme kořeny sekulární rovnice:

$$\boxed{f(\lambda) = 1 + \rho u^T \cdot (D - \lambda I)^{-1} \cdot u = 1 + \rho \cdot \sum_{i=1}^{n} \frac{u_i^2}{d_i - \lambda}.}$$

Pro dané koeficienty u_i a d_i.



Kořeny se hledají numericky třeba Newtonovou metodou.

Problém: $f(\lambda)$ může mít méně než n kořenů. Třeba když D a $D + \rho u u^T$ sdílí vlastní čísla, $u_i = 0$ nebo dva diagonální koeficienty D jsou stejné. Situace se nazývá deflace.

Ve skutečnosti je jednoduché deflaci vyřešit a zrychluje algoritmus. Část vlastních čísel D se přenese na $D + \rho u u^T$. Zrychlí se hlavně výpočet vlastních vektorů.

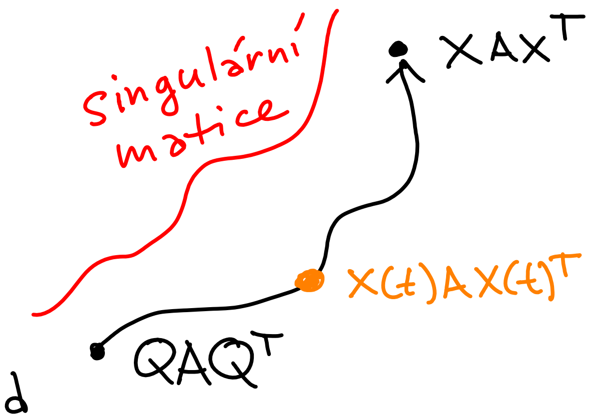
Cena metody je $O(n^3)$, typicky s menší konstantou než QR.

Metoda bisekce:

Jedna z prvních efektivních metod, založena na Sylvesterově větě o setrvačnosti. Ta říká, že matice A a $X^T A X$ mají pro regulární matici X stejná znaménka vlastních čísel.

Důkaz věty: BÚNO nechť A je regulární, jinak důkaz provedeme pro $A + \varepsilon I$, kde $\varepsilon \to 0$. Důkaz je topologický, uvažme $X(t) A X(t)^T$ pro $t \in [0;1]$, kde každá matice je regulární, $X(t)$ se spojitě mění, $X(1) = X$ a $X(0) = Q$. ← ortogonální

Nyní $X(0) A X(0)^T = Q A Q^T$ má stejná vlastní čísla jako A. Vlastní čísla se mění spojitě a nemohou změnit znaménko, jinak by nějaká $X(t) A X(t)^T$ byla singulární.



Zbývá zkonstruovat $X(t)$, $t \in [0;1]$. Uvažme rozklad $X = QR$, položme $X(t) = tX + (1-t)Q$, dokázat regularitu je snadné. $\square$

Uvažme LDU dekompozici $A - zI = L D L^T$ bez pivotace. Počty znamének na diagonále D je roven počtu vlastních čísel A $> z$, $= z$ a $< z$. Půlením přes různé hodnoty z můžeme identifikovat vlastní čísla A. Speciálně pokud hledáme na intervalu $[\alpha;\beta]$.

Cena: $O(kn)$ pro k vlastních čísel. Nenalezneme vlastní vektory!