

2. Αριθμητικές μέθοδοι

Σε αυτό το κεφάλαιο μελετάμε αριθμητικές μεθόδους για το πρόβλημα ιδιοτιμών για τετραγωνικούς πίνακες, δηλαδή μεθόδους για την προσέγγιση ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων τετραγωνικών πινάκων. Στην ενότητα 2.1 θα εξοικειωθούμε με τη βασική στρατηγική των αριθμητικών μεθόδων για το πρόβλημα ιδιοτιμών, που είναι η αναγωγή του προβλήματος με κατάλληλους μετασχηματισμούς ομοιότητας σε αντίστοιχο για απλούστερους πίνακες, καθώς και με την κατάσταση του προβλήματος ιδιοτιμών. Στην ενότητα 2.2 θα ασχοληθούμε με μια απλή αριθμητική μέθοδο, τη μέθοδο των δυνάμεων, κυρίως για ιστορικούς λόγους, αφού αυτή θεωρείται πλέον ξεπερασμένη. Η ενότητα 2.3 αφορά τις ιδιοτιμές Ερμητιανών τριδιαγώνιων πινάκων με κατάλληλους μετασχηματισμούς ομοιότητας, το πρόβλημα ιδιοτιμών για Ερμητιανούς πίνακες ανάγεται στο αντίστοιχο για Ερμητιανούς τριδιαγώνιους πίνακες. Η ενότητα 2.4 αναφέρεται στην αριθμητική μέθοδο LR για το πρόβλημα ιδιοτιμών, η οποία βασίζεται στην ανάλυση LU πινάκων. Η ενότητα 2.5 είναι βοηθητική: μελετάμε την ανάλυση QR πινάκων, η οποία στην πράξη γίνεται είτε με ανακλάσεις Householder είτε με περιστροφές Givens. Στη σημαντικότερη μέθοδο για το πρόβλημα ιδιοτιμών, τη μέθοδο QR , αφιερώνεται η τελευταία ενότητα. Η μέθοδος QR αποτελεί μετεξέλιξη της μεθόδου LR , και βασίζεται στην ανάλυση QR .

2.1 Προκαταρκτικά

Αυτή η προκαταρκτική ενότητα αναφέρεται σε δύο θέματα, ορισμένες γενικές παρατηρήσεις για αριθμητικές μεθόδους προσδιορισμού ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων πινάκων αφ' ενός και την κατάσταση του προβλήματος ιδιοτιμών αφ' ετέρου.

2.1.1 Γενικές παρατηρήσεις

Οι αριθμητικές μέθοδοι για τον προσδιορισμό ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων ενός πίνακα A βασίζονται συνήθως στην εξής ιδέα: Σε ένα πρώτο στάδιο με ένα πεπερασμένο πλήθος μετασχηματισμών ομοιότητας

$$\begin{aligned} A = A_0 &\rightarrow A_1 \rightarrow \cdots \rightarrow A_m =: B, \\ A_i &= T_i^{-1} A_{i-1} T_i, \quad i = 1, 2, \dots, m, \end{aligned}$$

ανάγονται τον πίνακα A σε έναν “απλούστερο” πίνακα B ,

$$B = A_m = T^{-1} A T, \quad \text{με } T := T_1 T_2 \cdots T_m,$$

και στο δεύτερο στάδιο προσδιορίζονται τις ιδιοτιμές λ και τα ιδιοδιανύσματα για τον B , $By = \lambda y$. Τότε, με $x := Ty = T_1 T_2 \cdots T_m y$, έχουμε, λόγω της σχέσης ομοιότητας $B = T^{-1} A T$, ότι $Ax = \lambda x$, δηλαδή ότι στην ιδιοτιμή λ του A αντιστοιχεί το ιδιοδιανύσμα x .

Ο πίνακας B επιλέγεται ώστε να έχει τις εξής δύο ιδιότητες:

- a) Οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του B μπορούν να υπολογισθούν εύκολα, δηλαδή με σχετικά λίγες πράξεις.
- b) Το πρόβλημα ιδιοτιμών για τον πίνακα B δεν έχει πολύ χειρότερη κατάσταση από το αντίστοιχο πρόβλημα για τον A , δηλαδή μικρές μεταβολές των στοιχείων του B δεν επηρεάζουν τις ιδιοτιμές του πολύ περισσότερο από αντίστοιχες μεταβολές του A .

Ας δούμε τώρα λίγο πώς επηρεάζεται η κατάσταση του προβλήματος ιδιοτιμών με μετασχηματισμούς ομοιότητας. Έχουμε

$$B = T^{-1} A T \quad \text{και} \quad B + \Delta B = T^{-1} (A + \Delta A) T, \quad \text{με} \quad \Delta A := T \Delta B T^{-1}.$$

Συνεπώς, για μια φυσική νόρμα πινάκων $\|\cdot\|$ και τον αντίστοιχο δείκτη κατάστασης κ έχουμε

$$\begin{aligned} \|B\| &\leq \kappa(T) \|A\|, \\ \|\Delta A\| &\leq \kappa(T) \|\Delta B\|, \end{aligned}$$

και συμπεραίνουμε ότι

$$(2.1) \quad \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \leq (\kappa(T))^2 \frac{\|\Delta B\|}{\|B\|}.$$

Η εκτίμηση (2.1) μπορεί να ερμηνευθεί ως εξής: Δεδομένου ότι οι πίνακες A και B έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές και το ίδιο συμβαίνει και με τους $A + \Delta A$ και $B + \Delta B$, “μικρή” μεταβολή $\|\Delta B\|/\|B\|$ στον B μπορεί να μεταβάλλει τις ιδιοτιμές τόσο, όσο και “μεγάλη” μεταβολή $(\kappa(T))^2 \|\Delta B\|/\|B\|$ στον A , όταν ο δείκτης κατάστασης $\kappa(T)$ είναι μεγάλος. Δηλαδή, αν ο δείκτης κατάστασης $\kappa(T)$ του πίνακα T είναι πολύ μεγαλύτερος της μονάδας, τότε το πρόβλημα ιδιοτιμών για τον πίνακα B έχει πολύ χειρότερη κατάσταση από το αντίστοιχο πρόβλημα για τον A . Επιδιώκουμε λοιπόν να επιλέγουμε τους πίνακες T_i έτσι ώστε να μην έχουν μεγάλο δείκτη κατάστασης $\kappa(T_i)$, οπότε και ο δείκτης κατάστασης $\kappa(T)$ του T ,

$$\kappa(T) = \kappa(T_1 T_2 \cdots T_m) \leq \kappa(T_1) \cdots \kappa(T_m),$$

δεν θα είναι πολύ μεγάλος, για σχετικά μικρές τιμές του m .

Στην πράξη επιλέγουμε είτε πίνακες απαλοιφής

$$T_i = \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & m_{i+1,i} & \ddots & \\ & \vdots & & \ddots & \\ 0 & & m_{n,i} & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{τέτοιους ώστε } |m_{ki}| \leq 1,$$

οπότε

$$T_i^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -m_{i+1,i} & \ddots & \\ & \vdots & & \ddots & \\ 0 & & -m_{n,i} & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

και επομένως, για τη νόρμα μεγίστου $\|\cdot\|_\infty$, $\kappa(T_i) \leq 4$, είτε ορθογώνιους πίνακες $T_i = U$, φερ' ειπείν ανακλάσεις του Householder ή περιστροφές του Givens (όπως θα δούμε αργότερα σε αυτό το κεφάλαιο), και την Ευκλείδεια νόρμα $\|\cdot\|_2$, οπότε $\kappa(T_i) = 1$. Η τελευταία αυτή σχέση έπεται από το γεγονός ότι για ορθογώνιους πίνακες U ισχύει

$$\|Ux\|_2^2 = (Ux, Ux)_2 = (U^T Ux, x)_2 = (x, x)_2 = \|x\|_2^2.$$

Συνήθως ο αρχικός πίνακας A ανάγεται στη γενική περίπτωση σε έναν πίνακα του Hessenberg $B = A_m$, δηλαδή πίνακα που κάτω από τη διαγώνιο μπορεί να έχει μη μηδενικά στοιχεία μόνο στην υποδιαγώνιο, στις θέσεις (i, j) με $i \geq j + 2$ έχει επομένως μηδενικά στοιχεία, και στην ειδική περίπτωση Ερμητιανών πινάκων σε έναν Ερμητιανό πίνακα του Hessenberg, δηλαδή σε έναν Ερμητιανό τριγωνικό πίνακα, βλ. και τις Παρατηρήσεις 2.3 και 2.4 στη συνέχεια.

2.1.2 Κατάσταση του προβλήματος ιδιοτιμών

Σε αυτή την ενότητα θα δούμε ορισμένα βασικά αποτελέσματα για την κατάσταση του προβλήματος ιδιοτιμών.

Έστω $\mu \in \mathbb{C}$ και $x \in \mathbb{C}^n$ ένα μοναδιαίο διάνυσμα, $\|x\|_2 = 1$. Έστω $r, r := Ax - \mu x$, το υπόλοιπο. Αν το υπόλοιπο είναι μηδέν, το μ είναι προφανώς ιδιοτιμή του A . Στη συνέχεια θα δούμε ότι, στην περίπτωση Ερμητιανών πινάκων, αν το υπόλοιπο είναι μικρό, τότε το μ είναι καλή προσέγγιση ιδιοτιμής του A .

Θεώρημα 2.1 (Μικρό υπόλοιπο συνεπάγεται καλή προσέγγιση ιδιοτιμής.) *Έστω $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ ένας Ερμητιανός πίνακας και $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ οι (πραγματικές) ιδιοτιμές τουν. Έστω $\mu \in \mathbb{C}$ και $x \in \mathbb{C}^n$ ένα μοναδιαίο διάνυσμα ως προς την Ευκλείδεια νόρμα, $\|x\|_2 = 1$. Άν $r := Ax - \mu x$ είναι το υπόλοιπο, τότε ισχύει*

$$(2.2) \quad \min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \mu| \leq \|r\|_2,$$

υπάρχει δηλαδή ιδιοτιμή του A που απέχει το πολύ $\|r\|_2$ από το μ .

Απόδειξη. Στην περίπτωση που το μ συμπίπτει με κάποια ιδιοτιμή, ο ισχυρισμός αληθεύει προφανώς. Υποθέτουμε λοιπόν στη συνέχεια ότι $\mu \neq \lambda_i$, $i = 1, \dots, n$. Έστω

$Q \in \mathbb{C}^{n,n}$ ένας ορθομοναδιαίος πίνακας τέτοιος ώστε

$$Q^*AQ = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n),$$

βλ. τη Σημείωση μετά την απόδειξη του Θεωρήματος 1.3 καθώς και το Θεώρημα 1.2 στην ειδικότερη περίπτωση συμμετρικού πίνακα A . Τότε, το υπόλοιπο r γράφεται στη μορφή $r = QDQ^*x - \mu x$, οπότε έχουμε

$$Q^*r = DQ^*x - \mu Q^*x = (D - \mu I_n)Q^*x.$$

Σύμφωνα με την υπόθεσή μας $\mu \neq \lambda_i$, $i = 1, \dots, n$, ο πίνακας $D - \mu I_n$ είναι αντιστρέψιμος, επομένως έχουμε $Q^*x = (D - \mu I_n)^{-1}Q^*r$, συνεπώς

$$(2.3) \quad \|Q^*x\|_2 \leq \|(D - \mu I_n)^{-1}\|_2 \cdot \|Q^*r\|_2.$$

Τώρα, για οποιοδήποτε διάνυσμα $y \in \mathbb{C}^n$, έχουμε

$$\|Q^*y\|_2^2 = (Q^*y, Q^*y)_2 = (QQ^*y, y)_2 = (y, y)_2 = \|y\|_2^2.$$

Επομένως, η (2.3) δίνει, αφού $\|x\|_2 = 1$,

$$(2.4) \quad 1 \leq \|(D - \mu I)^{-1}\|_2 \cdot \|r\|_2.$$

Αλλά,

$$(D - \mu I)^{-1} = \text{diag} \left(\frac{1}{\lambda_1 - \mu}, \dots, \frac{1}{\lambda_n - \mu} \right),$$

οπότε

$$(2.5) \quad \|(D - \mu I)^{-1}\|_2 = \max_{1 \leq i \leq n} \frac{1}{|\lambda_i - \mu|} = \frac{1}{\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \mu|},$$

συνεπώς η (2.4) οδηγεί στην επιθυμητή εκτίμηση (2.2). \square

Σύμφωνα με το Θεώρημα 2.1, επιθυμούμε το υπόλοιπο να είναι μικρό. Έστω τώρα A ένας συμμετρικός πίνακας και $x \in \mathbb{R}^n$ ένα μη μηδενικό διάνυσμα. Θα δούμε ότι το υπόλοιπο ελαχιστοποιείται, για δεδομένο x , για μία ακριβώς επιλογή, για το πηλίκο Rayleigh του x .

Θεώρημα 2.2 (Ελαχιστοποίηση του υπολοίπου για δεδομένο διάνυσμα.) Έστω $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ ένας συμμετρικός πίνακας και $x \in \mathbb{R}^n$ ένα μη μηδενικό διάνυσμα. Τότε ισχύει

$$(2.6) \quad \min_{\mu \in \mathbb{R}} \|Ax - \mu x\|_2 = \|Ax - \mu_A(x)x\|_2,$$

όπου $\mu_A(x) := \frac{(Ax, x)_2}{(x, x)_2}$ το πηλίκο του Rayleigh για το x .

Απόδειξη. Αμέσως διαπιστώνει κανείς ότι, αν ο ισχυρισμός ισχύει για κάποιο x , τότε ισχύει και για όλα τα μη μηδενικά πολλαπλάσιά του. Χωρίς περιορισμό της γενικότητας, υποθέτουμε λοιπόν ότι το x είναι μοναδιαίο ως προς την Ευκλείδεια νόρμα, $\|x\|_2 = 1$. Τότε, προφανώς, $\mu_A(x) = (Ax, x)_2$, και

$$\|Ax - \mu x\|_2^2 = (Ax - \mu x, Ax - \mu x)_2 = \|Ax\|_2^2 - 2(Ax, x)_2\mu + \mu^2 = \|Ax\|_2^2 - 2\mu_A(x)\mu + \mu^2.$$

Συνεπώς

$$\|Ax - \mu x\|_2^2 = \|Ax\|_2^2 - [\mu_A(x)]^2 + [\mu - \mu_A(x)]^2$$

και το αποτέλεσμα έπεται αμέσως. \square

Παρατήρηση 2.1 Έστω $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ ένας συμμετρικός πίνακας και $x \in \mathbb{R}^n$ ένα μη μηδενικό διάνυσμα. Συνδυάζοντας τα Θεώρηματα 2.1 και 2.2 οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι, αν σταθεροποιήσουμε ένα μη μηδενικό διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$, τότε το πηλίκο του Rayleigh $\mu_A(x)$ για το x αποτελεί μια λογική επιλογή προσέγγισης σε κάποια ιδιοτιμή του A , μεταξύ όλων των πραγματικών αριθμών μ . \square

Θα δούμε τώρα ένα αποτέλεσμα για την κατάσταση του προβλήματος ιδιοτιμών για διαγωνιοποιήσιμους πίνακες.

Θεώρημα 2.3 (Κατάσταση του προβλήματος ιδιοτιμών διαγωνιοποιήσιμων πινάκων.) Έστω $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ ένας διαγωνιοποιήσιμος πίνακας (βλ. Θεώρημα 1.1), οπότε $S^{-1}AS = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, με $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ τις ιδιοτιμές του A . Άν $\Delta A \in \mathbb{C}^{n,n}$ ένας πίνακας διαταραχής και μια ιδιοτιμή των διαταραγμένου πίνακα $A + \Delta A$, τότε

$$(2.7) \quad \min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \mu| \leq \kappa_2(S) \|\Delta A\|_2,$$

όπου $\kappa_2(S)$ ο δείκτης κατάστασης του πίνακα S ως προς την Ευκλείδεια νόρμα.

Απόδειξη. Στην περίπτωση που το μ συμπίπτει με κάποια ιδιοτιμή, ο ισχυρισμός αληθεύει προφανώς. Υποθέτουμε λοιπόν στη συνέχεια ότι $\mu \neq \lambda_i$, $i = 1, \dots, n$. Έστω $z \in \mathbb{C}^n$ ένα ιδιοδιάνυσμα του $A + \Delta A$ ως προς την ιδιοτιμή μ . Τότε έχουμε $(A + \Delta A)z = \mu z$, συνεπώς $(\mu I_n - A)z = \Delta Az$, δηλαδή $(\mu I_n - SDS^{-1})z = \Delta Az$, οπότε $S(\mu I_n - D)S^{-1}z = \Delta Az$. Σύμφωνα με την υπόθεσή μας $\mu \neq \lambda_i$, $i = 1, \dots, n$, ο πίνακας $\mu I_n - D$ είναι αντιστρέψιμος, επομένως η προηγούμενη σχέση δίνει $z = S(\mu I_n - D)^{-1}S^{-1}\Delta Az$. Επομένως, έχουμε

$$\|z\|_2 \leq \|S\|_2 \|(\mu I_n - D)^{-1}\|_2 \|S^{-1}\|_2 \|\Delta A\|_2 \|z\|_2 = \kappa_2(S) \|(\mu I_n - D)^{-1}\|_2 \|\Delta A\|_2 \|z\|_2,$$

δηλαδή

$$1 \leq \kappa_2(S) \|(\mu I_n - D)^{-1}\|_2 \|\Delta A\|_2.$$

Λαμβάνοντας τώρα υπ' όψιν τη (2.5) συμπεραίνουμε ότι

$$\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \mu| \leq \kappa_2(S) \|\Delta A\|_2,$$

δηλαδή ισχύει όντως η επιθυμητή εκτίμηση (2.7). \square

Σημείωση. Η ποσότητα $\kappa_2(S)$ στο προηγούμενο Θεώρημα είναι ένας συντελεστής κατάστασης του προβλήματος προσδιορισμού των ιδιοτιμών του πίνακα A , βλ. όμως και την Άσκηση 2.1

Από το Θεώρημα 2.3 έπεται ότι το πρόβλημα ιδιοτιμών για Ερμητιανούς πίνακες έχει πολύ καλή κατάσταση.

Πόρισμα 2.1 (Κατάσταση του προβλήματος ιδιοτιμών Ερμητιανών πινάκων.) Έστω $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ ένας Ερμητιανός πίνακας και $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ οι ιδιοτιμές του. Αν $\Delta A \in \mathbb{C}^{n,n}$ ένας πίνακας διαταραχής και μ ιδιοτιμή του διαταραγμένου πίνακα $A + \Delta A$, τότε

$$(2.8) \quad \min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \mu| \leq \|\Delta A\|_2.$$

Απόδειξη. Αφού ο A είναι Ερμητιανός, είναι ορθομοναδιαία διαγωνιοποιήσιμος, δηλαδή υπάρχει ορθομοναδιαίος πίνακας $Q \in \mathbb{C}^{n,n}$ τέτοιος ώστε $Q^*AQ = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$. Τώρα, $\|Q\|_2^2 = \rho(Q^*Q) = \rho(I_n) = 1$, συνεπώς $\|Q\|_2 = 1$ και αντίστοιχα $\|Q^*\|_2 = 1$, οπότε

$$\kappa_2(Q) = \|Q\|_2 \|Q^*\|_2 = 1,$$

και η (2.8) έπεται αμέσως από τη (2.7). \square

2.2 Η μέθοδος των δυνάμεων

Σε αυτή την ενότητα θα μελετήσουμε την απλούστερη αριθμητική μέθοδο για το πρόβλημα ιδιοτιμών, τη μέθοδο των δυνάμεων. Η μέθοδος αυτή θεωρείται πλέον ξεπερασμένη, την περιγράφουμε κυρίως για ιστορικούς λόγους.

Έστω $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ ένας πίνακας με ιδιοτιμές $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ τέτοιες ώστε

$$(2.9) \quad |\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|.$$

Υποθέτουμε, δηλαδή, ότι η κατ' απόλυτο τιμή μέγιστη ιδιοτιμή του A είναι απλή και πραγματική. (Υπενθυμίζουμε ότι στην περίπτωση πραγματικών πινάκων, αν λ_i είναι μια ιδιοτιμή, τότε και η συζυγής της $\bar{\lambda}_i$ είναι επίσης ιδιοτιμή, αφού το χαρακτηριστικό πολυώνυμο έχει πραγματικούς συντελεστές.) Υποθέτουμε επίσης ότι ο A έχει n γραμμικώς ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα, δηλαδή ότι είναι, όπως λέμε, *μη ελλιπής*.

Υπό αυτές τις προϋποθέσεις, η μέθοδος των δυνάμεων δίνει μια ακολουθία προσεγγίσεων της λ_1 , η οποία συγκλίνει στη λ_1 , καθώς και μια ακολουθία προσεγγίσεων του αντίστοιχου ιδιοδιανύσματος x^1 , η οποία συγκλίνει στο x^1 .

Θεωρούμε μια νόρμα $\|\cdot\|$ στον \mathbb{R}^n . Αρχίζοντας με ένα τυχαίο μοναδιαίο διάνυσμα $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, δηλαδή τέτοιο ώστε $\|x^{(0)}\| = 1$, κατασκευάζουμε μια ακολουθία μοναδιαίων διανυσμάτων $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$, $k = 1, 2, \dots$, ως εξής

$$(2.10) \quad x^{(k)} := \frac{1}{\|A^k x^{(0)}\|} A^k x^{(0)}.$$

Θα αποδείξουμε στη συνέχεια ότι η ακολουθία $(x^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ συγκλίνει προς το ιδιοδιανύσμα x^1 . Πρώτα όμως σημειώνουμε ότι, αν έχουμε προσδιορίσει το $x^{(k)}$, τότε για το $x^{(k+1)}$ έχουμε

$$x^{(k+1)} = \frac{1}{\|A^{k+1} x^{(0)}\|} A^{k+1} x^{(0)} = \frac{1}{\|AA^k x^{(0)}\|} AA^k x^{(0)},$$

δηλαδή

$$(2.11) \quad x^{(k+1)} = \frac{1}{\|Ax^{(k)}\|} Ax^{(k)} = \frac{1}{\|y^{(k)}\|} y^{(k)} \quad \text{με } y^{(k)} := Ax^{(k)}.$$

Οπως θα δούμε αργότερα, ενδείκνυται, για λόγους ευστάθειας, να χρησιμοποιούμε τη (2.11) αντί της (2.10), δηλαδή να κανονικοποιούμε τα διανύσματα σε κάθε βήμα και όχι έπειτα από k βήματα.

Ας αποδείξουμε τώρα τον ισχυρισμό μας ότι η ακολουθία $(x^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ συγκλίνει προς το ιδιοδιάνυσμα x^1 . Γράφουμε το $x^{(0)}$ ως γραμμικό συνδυασμό των ιδιοδιανυσμάτων x^1, \dots, x^n ,

$$x^{(0)} = \alpha_1 x^1 + \dots + \alpha_n x^n$$

και υποθέτουμε κατ' αρχάς ότι το α_1 είναι διάφορο του μηδενός, $\alpha_1 \neq 0$. Προφανώς, έχουμε

$$A^k x^{(0)} = \alpha_1 A^k x^1 + \dots + \alpha_n A^k x^n = \alpha_1 \lambda_1^k x^1 + \dots + \alpha_n \lambda_n^k x^n = \alpha_1 \lambda_1^k \left[x^1 + \sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k x^i \right],$$

οπότε, σύμφωνα με τη (2.10),

$$(2.12) \quad x^{(k)} = \frac{\alpha_1 \lambda_1^k}{|\alpha_1 \lambda_1^k|} \frac{1}{\|x^1 + \sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k x^i\|} \left[x^1 + \sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k x^i \right].$$

Τώρα, προφανώς,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k = 0, \quad i = 2, \dots, n,$$

οπότε

$$(2.13) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{\|x^1 + \sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k x^i\|} \left[x^1 + \sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k x^i \right] = \frac{1}{\|x^1\|} x^1.$$

Λαμβάνοντας τώρα υπ' όψιν και το γεγονός ότι

$$\frac{\alpha_1 \lambda_1^k}{|\alpha_1 \lambda_1^k|} \in \{-1, +1\},$$

από τις (2.12) και (2.13) συμπεραίνουμε ότι η (φραγμένη) ακολουθία $(x^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ έχει είτε ένα είτε δύο σημεία συσσώρευσης, τα διανύσματα

$$\pm \frac{1}{\|x^1\|} x^1.$$

Και τα δύο αυτά διανύσματα είναι ιδιοδιανύσματα του A ως προς την ιδιοτιμή λ_1 . Με αυτήν την έννοια λέμε ότι η ακολουθία $(x^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ συγκλίνει στο x^1 .

Έχοντας ήδη προσδιορίσει προσεγγίσεις $x^{(k)}$ ιδιοδιανυσμάτων του A ως προς την ιδιοτιμή λ_1 , θεωρούμε τα αντίστοιχα πηλίκα του Rayleigh $\lambda_1^{(k)}$,

$$(2.14) \quad \lambda_1^{(k)} := \frac{(Ax^{(k)}, x^{(k)})_2}{(x^{(k)}, x^{(k)})_2}, \quad k \in \mathbb{N}_0,$$

ως προσεγγίσεις της ιδιοτιμής λ_1 . Θα αποδείξουμε τώρα ότι οι εν λόγω προσεγγίσεις συγκλίνουν στη λ_1 . Όντως, έχουμε

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_1^{(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{(Ax^{(k)}, x^{(k)})_2}{(x^{(k)}, x^{(k)})_2} = \frac{(Ax^1, x^1)_2}{(x^1, x^1)_2},$$

συνεπώς

$$(2.15) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_1^{(k)} = \lambda_1.$$

Λίγα λόγια τώρα για την περίπτωση $\alpha_1 = 0$. Θεωρητικά, όταν το αρχικό διάνυσμα $x^{(0)}$ είναι γραμμικός συνδυασμός των x^i, \dots, x^n , $i \geq 2$, με μη μηδενική συνιστώσα στην κατεύθυνση του x^i , και το λ_i είναι απλή ιδιοτιμή τέτοια ώστε

$$|\lambda_i| > |\lambda_{i+1}| \geq \dots \geq |\lambda_n|,$$

η μέθοδος των δυνάμεων δίνει προσεγγίσεις των x^i και λ_i . Στην πράξη όμως τα πράγματα εξελίσσονται διαφορετικά. Έπειτα από κάποια βήματα της μεθόδου, λόγω σφαλμάτων στρογγύλευσης, το $x^{(k)}$ είναι γραμμικός συνδυασμός των x^1, \dots, x^n , με μη μηδενική συνιστώσα στην κατεύθυνση του x^1 . Κατά συνέπεια, οι προσεγγίσεις τείνουν και πάλι προς το ιδιοδιάνυσμα x^1 και την ιδιοτιμή λ_1 , αντίστοιχα.

Σημείωση. Όπως είδαμε προηγουμένως, ισχύει

$$A^k x^{(0)} = \alpha_1 \lambda_1^k \left[x^1 + \sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k x^i \right],$$

συνεπώς

$$(2.16) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\alpha_1 \lambda_1^k} A^k x^{(0)} \right] = x^1.$$

Από αυτή τη σχέση συμπεραίνουμε αμέσως ότι, στην περίπτωση $|\lambda_1| > 1$, οι απόλυτες τιμές τουλάχιστον μίας συνιστώσας των διανυσμάτων $A^k x^{(0)}$ τείνουν στο άπειρο, ενώ, στην περίπτωση $|\lambda_1| < 1$, τα διανύσματα $A^k x^{(0)}$ τείνουν στο μηδέν. Για να αποφύγουμε προβλήματα υπερχείλισης, στην πρώτη περίπτωση, και υπεκχείλισης, στη δεύτερη, δεν πρέπει να υπολογίζουμε τα $A^k x^{(0)}$ και εν συνεχεία να τα κανονικοποιούμε, όπως φαίνεται στη (2.10). Αυτό το πρόβλημα παρακάμπτεται, αν κανο-

νικοποιήσουμε σε κάθε βήμα, δηλαδή αν υπολογίσουμε τα $x^{(k)}$ χρησιμοποιώντας τη (2.11). \square

Υπολογιστικό κόστος, κριτήριο τερματισμού και ταχύτητα σύγκλισης της μεθόδου. Το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου των δυνάμεων, ανά επανάληψη, είναι:

- Ένας πολλαπλασιασμός πίνακα επί διάνυσμα, για τον υπολογισμό του $y^{(k)} = Ax^{(k)}$.
- Δύο υπολογισμοί εσωτερικών γινομένων, για τον υπολογισμό της προσέγγισης $\lambda_1^{(k)} = (y^{(k)}, x^{(k)})_2 / (x^{(k)}, x^{(k)})_2$. Αν χρησιμοποιούμε την Ευκλείδεια νόρμα, τότε αρκεί ένας υπολογισμός εσωτερικού γινομένου σε κάθε επανάληψη, αφού το διάνυσμα $x^{(k)}$ έχει Ευκλείδεια νόρμα ίση με ένα, συνεπώς $(x^{(k)}, x^{(k)})_2 = 1$.
- Ο υπολογισμός της νόρμας ενός διανύσματος, της $\|y^{(k)}\|$, και η κανονικοποίηση του διανύσματος $y^{(k)}$, δηλαδή ο πολλαπλασιασμός του $y^{(k)}$ επί $1/\|y^{(k)}\|$.

Από τους τρεις αυτούς υπολογισμούς, ο πλέον δαπανηρός είναι ο πολλαπλασιασμός πίνακα επί διάνυσμα, που απαιτεί $O(n^2)$ πράξεις. Αν λοιπόν εκτελέσουμε m επαναλήψεις, τότε το κόστος είναι $O(mn^2)$ πράξεις.

Για $\varepsilon > 0$ της επιλογής του χρήστη, ως κριτήρια τερματισμού των επαναλήψεων μπορούν να χρησιμοποιηθούν είτε το

$$\frac{|\lambda_1^{(k-1)} - \lambda_1^{(k)}|}{|\lambda_1^{(k)}|} \leq \varepsilon,$$

το οποίο αναφέρεται στην προσέγγιση του σχετικού σφάλματος της ιδιοτιμής λ_1 , είτε το

$$\|x^{(k)} - x^{(k+1)}\| \leq \varepsilon,$$

το οποίο αναφέρεται στην προσέγγιση του σφάλματος (που είναι και σχετικό, λόγω του ότι $\|x^{(k+1)}\| = 1$) του ιδιοδιανύσματος x^1 . Συνήθως προτιμάται το πρώτο κριτήριο τερματισμού, αφού είναι λιγότερο δαπανηρό.

Τέλος, σχετικά με την ταχύτητα σύγκλισης της μεθόδου των δυνάμεων, σημειώνουμε ότι το σφάλμα $x^1 - x^{(k)}$ οφείλεται στο άθροισμα

$$\sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k x^i,$$

βλ. τη (2.12). Για αρκετά μεγάλο πλήθος επαναλήψεων k , σε αυτό το άθροισμα υπερισχύει ο όρος

$$\frac{\alpha_2}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k x^2,$$

συνεπώς μπορούμε να πούμε ότι το σφάλμα είναι της τάξης $O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)$. Προφανώς, όσο μικρότερος είναι ο λόγος $\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$, τόσο ταχύτερη είναι η σύγκλιση.

2.3 Ιδιοτιμές Ερμητιανών τριδιαγώνιων πινάκων

Η σημαντικότερη αριθμητική μέθοδος προσέγγισης ιδιοτιμών πινάκων είναι η μέθοδος QR , με την οποία θα ασχοληθούμε αργότερα σε αυτό το κεφάλαιο. Οι ιδιοτιμές των Ερμητιανών τριδιαγώνιων πινάκων έχουν ιδιότητες που μας επιτρέπουν να τις προσεγγίσουμε και με άλλες αριθμητικές μεθόδους. Σε αυτή την ενότητα θα μελετήσουμε ιδιότητες ιδιοτιμών τέτοιων πινάκων.

Οι Ερμητιανοί τριδιαγώνιοι πίνακες δεν είναι τόσο ειδικοί όσο ενδεχομένως φαίνεται εκ πρώτης όψεως: Αφ' ενός εμφανίζονται συχνά στις εφαρμογές, αφ' ετέρου το πρόβλημα του προσδιορισμού ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων ενός Ερμητιανού πίνακα μπορεί να αναχθεί, με πεπερασμένου πλήθους μετασχηματισμούς ομοιότητας, όπως αναφέραμε ήδη στην ενότητα 2.1.1, βλ. επίσης την Παρατήρηση 2.3 στην ενότητα 2.5.1, σε πρόβλημα ιδιοτιμών Ερμητιανού τριδιαγώνιου πίνακα.

Θεωρούμε λοιπόν έναν Ερμητιανό τριδιαγώνιο πίνακα $A \in \mathbb{C}^{n,n}$,

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \bar{\beta}_2 & & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \bar{\beta}_3 & \\ \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} & \bar{\beta}_n \\ & & & \beta_n & \alpha_n \end{pmatrix},$$

με $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ πραγματικούς αριθμούς, φυσικά. Αν $\beta_i = 0$, για κάποιο $i \in \{1, \dots, n\}$,

τότε ο A γράφεται στη μορφή $A = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}$ με

$$A_1 = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \bar{\beta}_2 & & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \bar{\beta}_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{i-2} & \alpha_{i-2} & \bar{\beta}_{i-1} \\ 0 & & & \beta_{i-1} & \alpha_{i-1} \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} \alpha_i & \bar{\beta}_{i+1} & & 0 \\ \beta_{i+1} & \alpha_{i+1} & \bar{\beta}_{i+2} & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} & \bar{\beta}_n \\ 0 & & & \beta_n & \alpha_n \end{pmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές του A είναι προφανώς ιδιοτιμές του A_1 ή του A_2 . Οι πίνακες $A_1 \in \mathbb{C}^{i-1, i-1}$, $A_2 \in \mathbb{C}^{n-i+1, n-i+1}$ είναι Ερμητιανοί τριδιαγώνιοι. Συνεπώς, αν $\beta_i = 0$, το πρόβλημα του προσδιορισμού των ιδιοτιμών του A ανάγεται σε δύο απλούστερα, στον προσδιορισμό ιδιοτιμών των πινάκων A_1 και A_2 , που είναι μικρότερης διάστασης.

Χωρίς περιορισμό της γενικότητας, υποθέτουμε, λοιπόν, στη συνέχεια ότι τα στοιχεία β_2, \dots, β_n είναι μη μηδενικά. Συμβολίζουμε με p_i το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του πίνακα A_i ,

$$A_i = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \bar{\beta}_2 & & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \bar{\beta}_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{i-1} & \alpha_{i-1} & \bar{\beta}_i \\ 0 & & & \beta_i & \alpha_i \end{pmatrix},$$

$i = 1, \dots, n$. Αναπτύσσοντας την ορίζουσα $\det(A_i - \lambda I_i)$ ως προς την τελευταία στήλη, διαπιστώνουμε ότι

$$p_i(\lambda) = -\bar{\beta}_i \begin{vmatrix} \alpha_1 - \lambda & \bar{\beta}_2 & & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 - \lambda & \bar{\beta}_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{i-2} & \alpha_{i-2} - \lambda & \bar{\beta}_{i-1} \\ 0 & & & 0 & \beta_i \end{vmatrix} + (\alpha_i - \lambda) \det(A_{i-1} - \lambda I_{i-1}),$$

ή

$$p_i(\lambda) = -|\beta_i|^2 \det(A_{i-2} - \lambda I_{i-2}) + (\alpha_i - \lambda) \det(A_{i-1} - \lambda I_{i-1}),$$

συνεπώς

$$p_i(\lambda) = (\alpha_i - \lambda)p_{i-1}(\lambda) - |\beta_i|^2 p_{i-2}(\lambda), \quad i = 3, \dots, n.$$

Η σχέση αυτή ισχύει και για $i = 2$, αν ορίσουμε $p_0(\lambda) := 1$. Με αυτόν τον συμβολισμό, έχουμε επομένως

$$(2.17) \quad \begin{cases} p_1(\lambda) = \alpha_1 - \lambda, \\ p_i(\lambda) = (\alpha_i - \lambda)p_{i-1}(\lambda) - |\beta_i|^2 p_{i-2}(\lambda), \quad i = 2, \dots, n. \end{cases}$$

Σημειώνουμε ότι, όπως προκύπτει από τη (2.17), τα πολυώνυμα p_i έχουν πραγματικούς συντελεστές.

Με

$$q_0(\lambda) = 1, \quad q_i(\lambda) = (-1)^i \frac{1}{\bar{\beta}_2 \cdots \bar{\beta}_{i+1}} p_i(\lambda), \quad i = 1, \dots, n,$$

όπου θέσαμε $\beta_{n+1} := 1$, θεωρούμε το μη μηδενικό διάνυσμα $q(\lambda) \in \mathbb{C}^n$,

$$q(\lambda) := (q_0(\lambda), \dots, q_{n-1}(\lambda))^T,$$

και διαπιστώνουμε εύκολα ότι η (2.17) γράφεται ισοδύναμα στη μορφή

$$(2.18) \quad (A - \lambda I_n)q(\lambda) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -q_n(\lambda) \end{pmatrix}.$$

Αφού τα πολυώνυμα q_i είναι πολλαπλάσια των p_i , αν $\lambda = \lambda_i$ είναι μια ιδιοτιμή του A , τότε η (2.18) δίνει αμέσως

$$(2.19) \quad (A - \lambda_i I_n)q(\lambda_i) = 0,$$

δηλαδή το $q(\lambda_i)$ είναι ιδιοδιάνυσμα του A ως προς την ιδιοτιμή λ_i .

Παραγωγίζοντας τη (2.18) λαμβάνουμε

$$-q(\lambda) + (A - \lambda I_n)q'(\lambda) = - \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ q'_n(\lambda) \end{pmatrix}.$$

Θεωρώντας αυτή τη σχέση για $\lambda = \lambda_i$, παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο με το διάνυσμα $q(\lambda_i)$ και χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι

$$q(\lambda_i)^T (A - \lambda_i I_n) = ((A - \lambda_i I_n)q(\lambda_i))^T = 0,$$

βλ. τη (2.19), λαμβάνουμε

$$\|q(\lambda_i)\|^2 = q'_n(\lambda_i)q_{n-1}(\lambda_i),$$

και συμπεραίνουμε ότι

$$-\frac{p_{n-1}(\lambda_i)p'_n(\lambda_i)}{|\beta_2|^2 \cdots |\beta_n|^2} > 0,$$

δηλαδή

$$(2.20) \quad p_{n-1}(\lambda_i)p'_n(\lambda_i) < 0.$$

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι το λ_i είναι απλή ρίζα του p_n , δηλαδή ότι ο A έχει n ανά δύο διαφορετικές μεταξύ τους ιδιοτιμές. Επί πλέον, η (2.20) δίνει

$$\operatorname{sgn} p_{n-1}(\lambda_i) = -\operatorname{sgn} p'_n(\lambda_i)$$

και από τη (2.17) έπεται ότι

$$(2.21) \quad p_i(\mu) = -|\beta_i|^2 p_{i-2}(\mu), \quad \text{av } \mu \text{ ρίζα του } p_{i-1}.$$

Ισχυριζόμαστε τώρα ότι η (2.21) συνεπάγεται ότι $p_i(\mu)p_{i-2}(\mu) < 0$. Πράγματι, σε διαφορετική περίπτωση θα είχαμε $p_i(\mu) = 0$, οπότε, αναδρομικά,

$$0 = p_i(\mu) = p_{i-1}(\mu) = p_{i-2}(\mu) = \cdots = p_0(\mu) = 1,$$

άτοπο. Ανακεφαλαιώνοντας, αποδείξαμε το ακόλουθο αποτέλεσμα (ο ορισμός αλυσίδας του Sturm δίνεται αμέσως μετά):

Πρόταση 2.1 *Κάθε Ερμητιανός τριδιαγώνιος πίνακας $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ με μη μηδενικά στοιχεία στην υπερδιαγώνιό του, έχει n πραγματικές ιδιοτιμές $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_n$. Επί πλέον, τα πολυώνυμα p_i σχηματίζουν αλυσίδα του Sturm.* □

Ορισμός 2.1 Έστω r ένα πολυώνυμο με πραγματικούς συντελεστές. Τα πολυώνυμα r_0, r_1, \dots, r_m , με πραγματικούς συντελεστές, λέμε ότι αποτελούν *αλυσίδα του Sturm* για το r , αν $r_0 = r$ και:

- i. Όλες οι πραγματικές ρίζες του r είναι απλές.
- ii. Για κάθε πραγματική ρίζα ξ του r ισχύει $\text{sgn } r_1(\xi) = -\text{sgn } r'_0(\xi)$.
- iii. Για $i = 1, 2, \dots, m-1$ και για κάθε πραγματική ρίζα ξ του r_i ισχύει $r_{i+1}(\xi)r_{i-1}(\xi) < 0$.
- iv. Το πολυώνυμο r_m δεν έχει πραγματικές ρίζες.

Αναφέρουμε, χωρίς απόδειξη, ότι οι αλυσίδες του Sturm μας δίνουν το πλήθος των ριζών του r σε κάθε διάστημα $[a, b]$: Αν $w(x)$ είναι το πλήθος των αλλαγών προσήμου διαδοχικών όρων στην ακολουθία $r_0(x), r_1(x), \dots, r_m(x)$, τότε σε ένα διάστημα $[a, b]$ το r έχει ακριβώς $w(b) - w(a)$ ρίζες.

Οι προαναφερθείσες ιδιότητες των ιδιοτιμών του A , επιτρέπουν την προσέγγιση των ριζών του χαρακτηριστικού πολυωνύμου φερ' ειπείν με τη μέθοδο της διχοτόμησης. Εναλλακτικά, μπορεί προς τούτο να χρησιμοποιηθεί και η μέθοδος του Νεύτωνα. Ένας χονδρικός εντοπισμός των ιδιοτιμών λ , που είναι χρήσιμος στις αριθμητικές μεθόδους, μπορεί να γίνει με την ανισότητα του Gershgorin,

$$|\alpha_i - \lambda| \leq |\beta_i| + |\beta_{i+1}|, \quad \text{για κάποιο } i \in \{1, \dots, n\},$$

με $\beta_0 := \beta_{n+1} := 0$, ή, ακόμη καλύτερα, με λεπτομερέστερες εκδοχές της.

2.4 Η μέθοδος LR

Η αριθμητική μέθοδος LR για την προσέγγιση ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων πινάκων προτάθηκε από τον Rutishauser το 1958 και βασίζεται στην ανάλυση LU ενός πίνακα, με L κάτω τριγωνικό πίνακα με μονάδες στη διαγώνιο και U άνω τριγωνικό πίνακα. Η μέθοδος LR είναι επαναληπτική και θεωρείται πλέον ξεπερασμένη, αφού η μετεξέλιξή της, η μέθοδος QR , που προτάθηκε το 1961 από τον Francis και με την οποία θα ασχοληθούμε αργότερα, παρουσιάζει σαφή πλεονεκτήματα έναντι της

LR . Για ιστορικούς περισσότερο λόγους θα αναφερθούμε εδώ εντελώς συνοπτικά στη μέθοδο LR .

Θεωρούμε έναν πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ και την ανάλυσή του σε γινόμενο LU (που υποθέτουμε ότι υπάρχει). Θα χρησιμοποιούμε τον συμβολισμό R αντί U για τον άνω τριγωνικό πίνακα. Ορίζουμε διαδοχικά μια ακολουθία πινάκων $A_i, i \in \mathbb{N}$, ως ακολούθως (υποθέτοντας ότι όλοι οι πίνακες A_i που προκύπτουν αναλύονται σε γινόμενο LU): Θέτουμε $A_1 := A$, και, θεωρώντας την ανάλυση LU του πίνακα A_i , την οποία γράφουμε στη μορφή $A_i = L_i R_i$, ορίζουμε τον πίνακα A_{i+1} αλλάζοντας τη σειρά των L_i και R_i σε αυτό το γινόμενο, δηλαδή ως εξής

$$A_{i+1} := R_i L_i.$$

Δίνουμε τώρα ένα εύκολο, προκαταρκτικό αποτέλεσμα:

Πρόταση 2.2 Έστω ότι υπάρχουν όλες οι αναλύσεις $A_i = L_i R_i$. Τότε ισχύουν:

- a) Οι πίνακες A_{i+1} και A_i είναι όμοιοι συγκεκριμένα, $A_{i+1} = L_i^{-1} A_i L_i$, για $i \in \mathbb{N}$.
- β) Μεταξύ των A_{i+1} και των A έχουμε τη σχέση

$$A_{i+1} = (L_1 L_2 \cdots L_i)^{-1} A (L_1 L_2 \cdots L_i), \quad i \in \mathbb{N}_0.$$

- γ) Με τον κάτω τριγωνικό πίνακα $T_i := L_1 L_2 \cdots L_i$ και τον άνω τριγωνικό πίνακα $U_i := R_i R_{i-1} \cdots R_1$, ο πίνακας A^i αναλύεται σε γινόμενο LU στη μορφή

$$A^i = T_i U_i, \quad i \in \mathbb{N}.$$

Απόδειξη.

- α) Πολλαπλασιάζοντας την ισότητα $A_i = L_i R_i$ από αριστερά με L_i^{-1} και από δεξιά με L_i , λαμβάνουμε $L_i^{-1} A_i L_i = R_i L_i$, δηλαδή την προς απόδειξη σχέση $L_i^{-1} A_i L_i = A_{i+1}$.
- β) Η απόδειξη θα δοθεί επαγωγικά ως προς i . Για $i = 0$ ισχύει προφανώς λόγω του αποτελέσματος στο α). Για το βήμα της επαγωγής, υποθέτουμε ότι η σχέση

ισχύει για κάποιο i και θα αποδείξουμε ότι ισχύει και για $i + 1$. Πράγματι, έχουμε $A_{i+1} = L_i^{-1} A_i L_i$, συνεπώς, σύμφωνα με την υπόθεση της επαγωγής,

$$A_{i+1} = L_i^{-1} (L_1 L_2 \cdots L_{i-1})^{-1} A (L_1 L_2 \cdots L_{i-1}) L_i,$$

δηλαδή

$$A_{i+1} = (L_1 L_2 \cdots L_i)^{-1} A (L_1 L_2 \cdots L_i).$$

γ) Σημειώνουμε κατ' αρχάς ότι, σύμφωνα με το αποτέλεσμα στο β),

$$L_1 L_2 \cdots L_i A_{i+1} = A L_1 L_2 \cdots L_i.$$

Επομένως,

$$\begin{aligned} T_i U_i &= L_1 L_2 \cdots L_{i-1} (L_i R_i) R_{i-1} \cdots R_1 \\ &= L_1 L_2 \cdots L_{i-1} A_i R_{i-1} \cdots R_1 \\ &= A L_1 L_2 \cdots L_{i-1} R_{i-1} \cdots R_1 = A T_{i-1} U_{i-1}, \end{aligned}$$

και, αφού $T_1 U_1 = L_1 R_1 = A$, επαγωγικά διαπιστώνουμε αμέσως ότι $T_i U_i = A^i, i \in \mathbb{N}_0$. \square

Δίνουμε τώρα, χωρίς απόδειξη, ένα αποτέλεσμα σύγκλισης της μεθόδου LR .

Θεώρημα 2.4 Έστω $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ ένας πίνακας για τον οποίον ικανοποιούνται οι εξής συνθήκες:

- a) Η μέθοδος LR μπορεί να υλοποιηθεί για τον A , δηλαδή, για κάθε $i \in \mathbb{N}$, οι πίνακες A_i αναλύονται στη μορφή $A_i = L_i R_i$, οπότε $A_{i+1} := R_i L_i$.
- β) Για τις ιδιοτιμές $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ του A ισχύει

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|.$$

- γ) Οι πίνακες S και S^{-1} στη σχέση $A = S^{-1} D S$, με $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, αναλύονται σε γινόμενα LU . (Οτι ο A είναι διαγωνιοποίησιμος, προκύπτει από το β) παραπάνω.)

Τότε, οι πίνακες A_i, R_i, L_i συγκλίνουν και ισχύει

$$\lim_{i \rightarrow \infty} A_i = \lim_{i \rightarrow \infty} R_i = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * & \dots & * \\ & \ddots & \dots & * \\ & & \ddots & * \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}, \quad \lim_{i \rightarrow \infty} L_i = I_n. \quad \square$$

Παρατηρήσεις 2.2 Δύο τελευταίες παρατηρήσεις σχετικά με τη μέθοδο LR :

1. Υπάρχουν διάφορες εκδοχές του Θεωρήματος 2.4, με ασθενέστερες συνθήκες όσον αφορά την υπόθεση στο β).
2. Αν ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος, ο αλγόριθμος LR καταστρέφει τη συμμετρία. Αν αντί της ανάλυσης LU χρησιμοποιήσουμε την ανάλυση του Cholesky LL^T , όπου L κάτω τριγωνικός πίνακας με θετικά διαγώνια στοιχεία, οδηγούμαστε στην ακόλουθη εκδοχή που διατηρεί τη συμμετρία:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1 &:= A, \\ \tilde{A}_i &= L_i L_i^T, \\ \tilde{A}_{i+1} &:= L_i^T L_i = L_i^T \tilde{A}_i (L_i^T)^{-1} = L_i^{-1} \tilde{A}_i L_i, \\ \tilde{A}_i &= L_{i-1}^{-1} \cdots L_1^{-1} A L_1 \cdots L_{i-1} = (L_1 \cdots L_{i-1})^T A ((L_1 \cdots L_{i-1})^T)^{-1}, \\ A^i &= L_1 \cdots L_i L_i^T \cdots L_1^T = (L_1 \cdots L_i) (L_1 \cdots L_i)^T. \end{aligned}$$

2.5 Ανάλυση QR

Έστω $A \in \mathbb{R}^{m,n}$, $m \geq n$, ένας πίνακας. Σε αυτή την ενότητα θα ασχοληθούμε με αριθμητικές μεθόδους προσδιορισμού (δηλαδή προσέγγισης) ορθογώνιου πίνακα $Q \in \mathbb{R}^{m,m}$ και άνω τραπεζοειδός πίνακα $R \in \mathbb{R}^{m,n}$ (δηλαδή με μηδενικά στοιχεία R_{ij} για $i > j$) τέτοιων ώστε

$$(2.22) \quad A = QR.$$

Πριν προχωρήσουμε αναφέρουμε ότι δοθείσης της ανάλυσης (2.22) και ενός διαγώνιου πίνακα $D \in \mathbb{R}^{m,m}$, κάθε διαγώνιο στοιχείο του οποίου είναι είτε 1 είτε -1, και η

ανάλυση $A = (QD)(DR)$ έχει τις επιθυμητές ιδιότητες, δηλαδή η ανάλυση QR δεν είναι μονοσήμαντα ορισμένη.

Αφού ζητούμε ο πίνακας R να είναι άνω τραπεζοειδής, αναγκαστικά οι τελευταίες $m - n$ γραμμές του θα είναι μηδενικές, συνεπώς θα είναι της μορφής $\begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}$ με $R_1 \in \mathbb{R}^{n,n}$. Με αντίστοιχη διάσπαση $Q = (Q_1 \ Q_2)$ του πίνακα Q , με $Q_1 \in \mathbb{R}^{m,n}$ και $Q_2 \in \mathbb{R}^{m,m-n}$, έχουμε προφανώς

$$A = QR = (Q_1 \ Q_2) \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix} = Q_1 R_1.$$

Η ανάλυση $A = Q_1 R_1$, όπου τώρα ο Q δεν είναι πλέον τετραγωνικός, άρα ούτε ορθογώνιος, αλλά οι στήλες του εξακολουθούν να είναι ορθομοναδιαία διανύσματα και ο R_1 είναι άνω τριγωνικός, καλείται ανάλυση QR οικονομικού μεγέθους ή και απλώς ανάλυση QR . Αντίστροφα, από την ανάλυση $A = Q_1 R_1$ οικονομικού μεγέθους οδηγούμαστε σε ανάλυση QR με προφανή τρόπο.

Στην ειδική περίπτωση που οι n στήλες του A είναι γραμμικώς ανεξάρτητα διανύσματα του \mathbb{R}^m , η οικονομικού μεγέθους ανάλυση $Q_1 R_1$, συνεπώς και η ανάλυση QR , μπορεί να αποδειχθεί πολύ εύκολα. Όντως, ο πίνακας $A^T A$ είναι τότε, όπως διαπιστώνει κανείς αμέσως, συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Επομένως, σύμφωνα με την ανάλυση του Cholesky, ισχύει

$$(2.23) \quad A^T A = R_1^T R_1,$$

με έναν αντιστρέψιμο, άνω τριγωνικό πίνακα $R_1 \in \mathbb{R}^{n,n}$. Τότε ισχύει βεβαίως $A = AR_1^{-1} \cdot R_1$ και οι στήλες του πίνακα Q_1 , $Q_1 := AR_1^{-1}$, είναι ορθομοναδιαία διανύσματα, αφού

$$Q_1^T Q_1 = (R_1^{-1})^T A^T A R_1 = (R_1^{-1})^T R_1^T R_1 R_1^{-1} = (R_1^{-1})^T R_1^T = (R_1 R_1^{-1})^T = I_n.$$

Μάλιστα, στην προκειμένη περίπτωση, είναι γνωστό ότι αν απαιτήσουμε ο R_1 να έχει θετικά στοιχεία $(R_1)_{ii}$, τότε η ανάλυση $Q_1 R_1$ είναι μονοσήμαντα ορισμένη.

Στη συνέχεια θα δούμε ότι η ανάλυση QR είναι εφικτή και στη γενική περίπτωση.

Στην ανάλυση QR βασίζεται η πλέον διαδεδομένη αριθμητική μέθοδος για την προσέγγιση ιδιοτιμών πινάκων, η μέθοδος QR . Επί πλέον, η ανάλυση QR παίζει

σημαντικό ρόλο στην αριθμητική επίλυση του γραμμικού προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων.

Υπάρχουν διάφορες τεχνικές στις οποίες βασίζονται οι αριθμητικές μέθοδοι για τον προσδιορισμό αναλύσεων QR . Οι πλέον διαδεδομένες βασίζονται στη μέθοδο ορθοκανονικοποίησης των Gram–Schmidt, στους μετασχηματισμούς του Householder και στις περιστροφές του Givens. Οι μετασχηματισμοί του Householder και οι περιστροφές του Givens παρουσιάζουν σαφή πλεονεκτήματα έναντι της μεθόδου ορθοκανονικοποίησης των Gram–Schmidt. Γι' αυτό και θα τις μελετήσουμε στις δύο παραγράφους που ακολουθούν. Για τη μέθοδο ορθοκανονικοποίησης των Gram–Schmidt παραπέμπουμε στην Άσκηση 2.4.

2.5.1 Μετασχηματισμοί του Householder

Σε αυτήν την παράγραφο θα μελετήσουμε τους μετασχηματισμούς του Householder. Οι μετασχηματισμοί αυτοί χρησιμοποιούνται στην ανάλυση QR πινάκων, καθώς και στην αναγωγή πινάκων σε μορφή Hessenberg, και στην ειδική περίπτωση Ερμητιανών πινάκων σε Ερμητιανούς τριδιαγώνιους πίνακες.

Η βασική ιδέα στην ανάλυση QR με μετασχηματισμούς του Householder είναι εντελώς ανάλογη εκείνης στην απαλοιφή του Gauss χωρίς οδήγηση: Χρησιμοποιώντας κατάλληλους ορθογώνιους μετασχηματισμούς, τους λεγόμενους μετασχηματισμούς του Householder, γράφουμε πρώτα τον πίνακα A σε άνω τραπεζοειδή μορφή, όπως θα εξηγήσουμε στη συνέχεια.

Ορισμός 2.2 Ένας $n \times n$ πραγματικός πίνακας U της μορφής

$$(2.24) \quad U = I_n - 2u u^T,$$

όπου το διάνυσμα $u \in \mathbb{R}^n$ έχει Ευκλείδεια νόρμα ίση με ένα, λέγεται μετασχηματισμός του Householder στον \mathbb{R}^n .

Οι μετασχηματισμοί του Householder λέγονται και “στοιχειώδεις Ερμητιανοί” ή “στοιχειώδεις πίνακες ανάκλασης”. Για την εξήγηση για τον όρο στοιχειώδεις πίνακες ανάκλασης παραπέμπουμε στην Άσκηση 2.3. Οι μετασχηματισμοί του House-

holder είναι συμμετρικοί πίνακες, αφού

$$U^T = I_n - 2(u u^T)^T = I_n - 2u u^T = U,$$

καθώς επίσης και ορθογώνιοι, αφού $u^T u = \|u\|^2 = 1$ και συνεπώς

$$\begin{aligned} U^T U &= U^2 = (I_n - 2u u^T)(I_n - 2u u^T) = I_n - 4u u^T + 4u u^T u u^T \\ &= I_n - 4u u^T + 4u u^T = I_n. \end{aligned}$$

Συχνά, αντί της μορφής (2.24), η οποία προϋποθέτει μοναδιαίο διάνυσμα u , χρησιμοποιούμε μετασχηματισμούς του Householder στη μορφή

$$(2.25) \quad U = I_n - \frac{1}{\vartheta} u u^T,$$

όπου u ένα μη μηδενικό διάνυσμα του \mathbb{R}^n και $\vartheta = \|u\|^2/2$. Ο πίνακας που δίνεται από τη (2.25) είναι πράγματι μετασχηματισμός του Householder, αφού με $v = u/\|u\|$ έχουμε προφανώς $\|v\| = 1$ και $U = I_n - 2v v^T$.

Η βασική ιδιότητα των μετασχηματισμών του Householder είναι ότι πρόκειται για ορθογώνιους μετασχηματισμούς, που, όταν εφαρμόζονται σε κατάλληλα διανύσματα, μετατρέπουν σε μηδενικά πολλές συνιστώσες τους. Φερ' ειπείν, ισχύει το εξής

Λήμμα 2.1 Έστω $x \in \mathbb{R}^n$ και $\sigma = \pm\|x\|$. Έστω ότι $x \neq -\sigma e^1$, όπου $e^1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^n$. Άντοντας $u = x + \sigma e^1$ και $\vartheta = \|u\|^2/2$, τότε για τον μετασχηματισμό του Householder U , $U = I_n - uu^T/\vartheta$, έχουμε $Ux = -\sigma e^1$.

Απόδειξη. Έστω x_1 η πρώτη συνιστώσα του x . Τότε

$$\begin{aligned} \vartheta &= \frac{\|u\|^2}{2} = \frac{(x + \sigma e^1)^T(x + \sigma e^1)}{2} \\ &= \frac{x^T x + \sigma(e^1)^T x + \sigma x^T e^1 + \sigma^2(e^1)^T e^1}{2} \\ &= \frac{x^T x + 2\sigma x_1 + \sigma^2}{2} \\ &= \frac{\sigma^2 + 2\sigma x_1 + \sigma^2}{2} = \sigma^2 + \sigma x_1, \end{aligned}$$

συνεπώς

$$\begin{aligned}
 Ux &= x - \frac{1}{\vartheta} uu^T x \\
 &= x - \frac{1}{\sigma^2 + \sigma x_1} (x + \sigma e^1) (x + \sigma e^1)^T x \\
 &= x - \frac{1}{\sigma^2 + \sigma x_1} (x + \sigma e^1) (x^T x + \sigma x_1) \\
 &= x - (x + \sigma e^1) = -\sigma e^1.
 \end{aligned}$$

□

Έστω $x \in \mathbb{R}^n$. Το διάνυσμα u του Λήμματος 2.1 υπολογίζεται τότε με τους τύπους $u_1 = x_1 + \sigma$ και $u_i = x_i$, $i = 2, \dots, n$, και αποθηκεύεται στη θέση του x . Στην πράξη επιλέγουμε συνήθως $\sigma = \text{sgn}(x_1)\|x\|$ για να αποφύγουμε σφάλματα στρογγύλευσης κατά τον υπολογισμό του u .

Μετά την κατασκευή του U , πολλές φορές θέλουμε να υπολογίσουμε το γινόμενο UA , όπου A ένας $n \times r$ πραγματικός πίνακας, όπως παραδείγματος χάριν στο επόμενο θεώρημα. Γράφοντας τον A κατά στήλες, $A = (a^1, \dots, a^r)$ με $a^i \in \mathbb{R}^n$, βλέπουμε αμέσως ότι $UA = (Ua^1, \dots, Ua^r)$. Το πρόβλημα δηλαδή ανάγεται στον υπολογισμό διανυσμάτων Ua , με $a \in \mathbb{R}^n$, τα οποία υπολογίζονται ως

$$Ua = \left(I_n - \frac{1}{\vartheta} uu^T \right) a = a - \frac{1}{\vartheta} (u^T a) u$$

με $2n$ πολλαπλασιασμούς. Το αποτέλεσμα Ua αποθηκεύεται στη θέση του a . Τονίζουμε ότι, όταν μας ενδιαφέρει η δράση του $n \times n$ πίνακα U , δηλαδή ο υπολογισμός του Ua για δεδομένο a , δεν χρειάζεται να κατασκευάσουμε τον πίνακα U .

Η σημασία των μετασχηματισμών του Householder φαίνεται στο επόμενο βασικό αποτέλεσμα.

Θεώρημα 2.5 Έστω A ένας $m \times n$ πραγματικός πίνακας και $r = \min(m - 1, n)$. Τότε υπάρχουν μετασχηματισμοί του Householder ή μοναδιαίοι πίνακες $U_1, \dots, U_r \in \mathbb{R}^{m,m}$, τέτοιοι ώστε ο $m \times n$ πίνακας A_{r+1} ,

$$(2.26) \quad A_{r+1} = U_r U_{r-1} \cdots U_1 A,$$

να είναι άνω τραπεζοειδής.

Απόδειξη. Όπως στη μέθοδο απαλοιφής του Gauss, η ιδέα είναι να κατασκευάσουμε μετασχηματισμούς του Householder U_k , $k = 1, \dots, r$, τέτοιους ώστε ο πολλαπλασιασμός από αριστερά με U_k να μετατρέπει σε μηδενικά όλα τα στοιχεία της στήλης k του δευτέρου μέλους, τα οποία βρίσκονται κάτω από τη διαγώνιο.

Πριν από το πρώτο βήμα γράφουμε τον $A = A_1$ στη μορφή

$$A_1 = (c_1 | D_1),$$

όπου c_1 είναι η πρώτη στήλη του A και D_1 ένας $m \times (n - 1)$ πίνακας. Αν όλες οι συνιστώσες του c_1 , εκτός ίσως από την πρώτη, είναι μηδέν, τότε το πρώτο βήμα παραλείπεται, δηλαδή θέτουμε $U_1 = I_m$. Διαφορετικά, σύμφωνα με το Λήμμα 2.1, προσδιορίζουμε ένα διάνυσμα u_1 του \mathbb{R}^m και έναν θετικό αριθμό ϑ_1 , έτσι ώστε ο $m \times m$ πίνακας

$$U'_1 = I_m - \frac{1}{\vartheta_1} u_1 u_1^T$$

να είναι μετασχηματισμός του Householder με την ιδιότητα $U'_1 c_1 = p_{11} e^1$ με $e^1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^m$, δηλαδή θέτουμε $\sigma = \pm \|c_1\|$ και έχουμε $u_1 = c_1 + \sigma e^1$, $\vartheta_1 = \|u_1\|^2/2$ και $p_{11} = -\sigma$. Κατόπιν θέτουμε $U_1 = U'_1$, $A_2 = U_1 A_1$ και έχουμε

$$A_2 = (U_1 c_1 | U_1 D_1) = (p_{11} e^1 | U_1 D_1).$$

Γενικά τώρα, μετά το βήμα $k - 1$, ο $m \times n$ πίνακας $A_k = U_{k-1} U_{k-2} \cdots U_1 A$ είναι της μορφής

$$A_k = \begin{pmatrix} R_k & r_k & B_k \\ 0 & c_k & D_k \end{pmatrix},$$

όπου ο $(k - 1) \times (k - 1)$ πίνακας R_k είναι άνω τριγωνικός και $c_k \in \mathbb{R}^{m-k+1}$. Αν όλες οι συνιστώσες του c_k , εκτός ίσως από την πρώτη, είναι μηδέν, τότε το βήμα k παραλείπεται, δηλαδή θέτουμε $U_k = I_m$. Διαφορετικά, σύμφωνα με το Λήμμα 2.1, προσδιορίζουμε ένα διάνυσμα u_k του \mathbb{R}^{m-k+1} και έναν θετικό αριθμό ϑ_k , έτσι ώστε ο $(m - k + 1) \times (m - k + 1)$ πίνακας

$$U'_k = I_{m-k+1} - \frac{1}{\vartheta_k} u_k u_k^T$$

να είναι μετασχηματισμός του Householder με την ιδιότητα $U'_k c_k = p_{kk} e^1$ με $e^1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^{m-k+1}$. Ορίζουμε τώρα τον $m \times m$ πίνακα U_k ,

$$U_k = \begin{pmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & U'_k \end{pmatrix},$$

όπου I_{k-1} είναι ο $(k-1) \times (k-1)$ μοναδιαίος πίνακας. Εύκολα διαπιστώνουμε ότι ο U_k είναι ένας μετασχηματισμός του Householder, βλ. την Άσκηση 2.2. Θέτοντας τώρα $A_{k+1} = U_k A_k$ έχουμε

$$A_{k+1} = \begin{pmatrix} R_k & r_k & B_k \\ 0 & p_{kk} e^1 & U'_k D_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{k+1} & r_{k+1} & B_{k+1} \\ 0 & c_{k+1} & D_{k+1} \end{pmatrix},$$

με

$$R_{k+1} = \begin{pmatrix} R_k & r_k \\ 0 & p_{kk} \end{pmatrix},$$

$c_{k+1} \in \mathbb{R}^{m-k}$ κ.λπ.. Ο ισχυρισμός του θεωρήματος είναι τώρα προφανής. \square

Στις εφαρμογές, σύμφωνα με όσα αναφέραμε προηγουμένως, τα διανύσματα $u_k \in \mathbb{R}^{m-k+1}$ αποθηκεύονται στις θέσεις μνήμης που κατείχαν τα c_k , ενώ οι αριθμοί ϑ_k και p_{kk} αποθηκεύονται σε νέες θέσεις. Για να υπολογισθεί ο A_{k+1} τέλος, αρκεί να υπολογίσουμε και να αποθηκεύσουμε τον $U'_k D_k$ στη θέση του αρχικού D_k κατά στήλες, όπως είδαμε προηγουμένως.

Επειδή οι μετασχηματισμοί του Householder είναι ορθογώνιοι πίνακες, εύκολα βλέπουμε, σύμφωνα με το Θεώρημα 2.4, ότι για κάθε $m \times n$ πραγματικό πίνακα A υπάρχει $m \times m$ ορθογώνιος πίνακας Q (μάλιστα σύμφωνα με τη (2.26) μπορούμε να πάρουμε

$$(2.27) \quad Q = U_r U_{r-1} \cdots U_1,$$

τέτοιος ώστε ο πίνακας $A_{r+1} = QA$ να είναι άνω τραπεζοειδής. Συνεπώς, έχουμε $A = Q^T A_{r+1}$ και αυτή είναι μια ανάλυση QR του πίνακα A .

Παρατήρηση 2.3 Όπως αναφέραμε ήδη στην ενότητα 2.3 οι Ερμητιανοί πίνακες μπορούν να αναχθούν με μετασχηματισμούς ομοιότητας σε Ερμητιανούς τριδιαγώνιους

πίνακες (με τις ίδιες ιδιοτιμές). Αυτό μπορεί να επιτευχθεί και με μετασχηματισμούς Householder, ιδιαίτερα δηλαδή με ορθομοναδιαίους πίνακες. Αφού εμείς σε αυτή την ενότητα ασχοληθήκαμε με πραγματικούς πίνακες Householder, θα αποδείξουμε με επαγωγή το σχετικό αποτέλεσμα μόνο στην πραγματική περίπτωση, δηλαδή για συμμετρικούς πίνακες. Το γενικότερο αποτέλεσμα αποδεικνύεται εντελώς αντίστοιχα.

Έστω λοιπόν $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ ένας συμμετρικός πίνακας. Θέτουμε $A_0 := A$ και υποθέτουμε ότι ο πίνακας A_{k-1} είναι ήδη της μορφής

$$\begin{pmatrix} J_{k-1} & c_{k-1} & 0 \\ c_{k-1}^T & \alpha_k & a_k^T \\ 0 & a_k & D_k \end{pmatrix},$$

με J_{k-1} έναν $(k-1) \times (k-1)$ τριδιαγώνιο πίνακα, $c_{k-1} \in \mathbb{R}^{k-1}$ ένα διάνυσμα με μηδενικές τις πρώτες $k-2$ συνιστώσες, δηλαδή

$$\begin{pmatrix} J_{k-1} & c_{k-1} \\ c_{k-1}^T & \alpha_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & \ddots & \ddots & \beta_k \\ 0 & & \beta_k & \alpha_k \end{pmatrix}$$

και $D_k \in \mathbb{R}^{n-k,n-k}$ έναν συμμετρικό πίνακα. Προφανώς, ο $A_0 = A$ είναι αυτής της μορφής, συνεπώς για $k=1$ ικανοποιείται η υπόθεσή μας. Θα αποδείξουμε στη συνέχεια ότι με κατάλληλο μετασχηματισμό Householder U_k (ή σε ειδική περίπτωση, βλ. παρακάτω, απλώς με τον μοναδιαίο πίνακα) ο πίνακας

$$A_k = U_k^{-1} A_{k-1} U_k = U_k A_{k-1} U_k$$

είναι της επιθυμητής μορφής, γεγονός που οδηγεί στο συμπέρασμα ότι ο πίνακας $B := A_{n-2}$ είναι συμμετρικός, τριδιαγώνιος και όμοιος του A . Τώρα, σύμφωνα με το Λήμμα 2.1, υπάρχει ένας πίνακας Householder

$$U'_k \in \mathbb{R}^{n-k,n-k}, \quad U'_k = I_{n-k} - 2u_{n-k}u_{n-k}^T,$$

τέτοιος ώστε $U'_k a_k = -\sigma e^1$, με $e^1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^{n-k}$. (Προφανώς, στην περίπτωση που το a_k είναι πολλαπλάσιο του e^1 , δεν χρειάζεται να κάνουμε κάτι σε αυτό το βήμα, δηλαδή επιλέγουμε απλώς $U'_k = I_{n-k}$.) Ορίζουμε τώρα τον πίνακα Householder $U_k \in \mathbb{R}^{n,n}$,

$$U_k := \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & U'_k \end{pmatrix},$$

βλ. την Ασκηση 2.2, και, με $\beta_{k+1} := -\sigma$, έχουμε

$$A_k = U_k A_{k-1} U_k = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & 0 & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & & & 0 & \\ \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \beta_k & & & & \\ & & \beta_k & \alpha_k & \beta_{k+1} & 0 & \dots & 0 \\ & & & & \beta_{k+1} & & & \\ & & & & & 0 & & \\ 0 & & & & & \vdots & U'_k D_k U_k & \\ & & & & & 0 & & \end{pmatrix},$$

γεγονός που ολοκληρώνει το επαγωγικό βήμα.

Σημειώνουμε ακόμα ότι υπάρχουν και άλλες τεχνικές για την αναγωγή Ερμητιανών πινάκων σε όμοιο Ερμητιανό τριδιαγώνιο πίνακα: αναφέρουμε χωρίς λεπτομέρειες ότι αυτό μπορεί να γίνει και με περιστροφές Givens καθώς και με τη μέθοδο του Lanczos. \square

Παρατήρηση 2.4 Στην περίπτωση ενός γενικού πραγματικού $n \times n$ πίνακα (αλλά ακόμα και μιγαδικού πίνακα, αν θεωρήσουμε και μιγαδικούς πίνακες Householder), η διαδικασία που περιγράψαμε στην προηγούμενη Παρατήρηση εφαρμόζεται επίσης, με μόνη διαφορά ότι οι πίνακες A_i δεν είναι πλέον συμμετρικοί. Τα στοιχεία του τελικού αποτελέσματος $B = A_{n-2}$ στις θέσεις (i, j) , $i \geq j+2$, είναι ίσα με μηδέν, αλλά λόγω έλλειψης συμμετρίας στις θέσεις (i, j) , $j \geq i+2$, υπάρχουν γενικά μη μηδενικά στοιχεία, ο B είναι δηλαδή πίνακας Hessenberg. Σημειώνουμε επίσης ότι η αναγωγή ενός πίνακα σε όμοιο του σε μορφή Hessenberg μπορεί να επιτευχθεί και με συνδυασμό μετασχηματισμών (πινάκων) μετάθεσης και μετασχηματισμών απαλοιφής. \square

2.5.2 Περιστροφές του Givens

Έστω $\vartheta \in [0, 2\pi)$. Ο 2×2 πίνακας $R(\vartheta)$,

$$R(\vartheta) := \begin{pmatrix} \cos \vartheta & -\sin \vartheta \\ \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix},$$

είναι, προφανώς, ορθογώνιος. Άν $x = (x_1, x_2)^T \in \mathbb{R}^2$, τότε το $\tilde{x} := R(\vartheta)x$ προκύπτει δια περιστροφής του x περί την αρχή των αξόνων κατά γωνία ϑ κατά τη θετική φορά (την αντίθετη εκείνης των δεικτών του ωρολογίου). Αυτό μπορούμε να το διαπιστώσουμε εύκολα ως εξής: αν a είναι η Ευκλείδεια νόρμα του x και $\varphi \in [0, 2\pi)$ η γωνία μεταξύ του οριζόντιου άξονα (του άξονα των x_1) και του διανύσματος x , τότε προφανώς

$$x_1 = a \cos \varphi, \quad x_2 = a \sin \varphi.$$

Αν συμβολίσουμε με \tilde{x} το διάνυσμα που προκύπτει δια περιστροφής του x κατά γωνία ϑ , τότε, προφανώς,

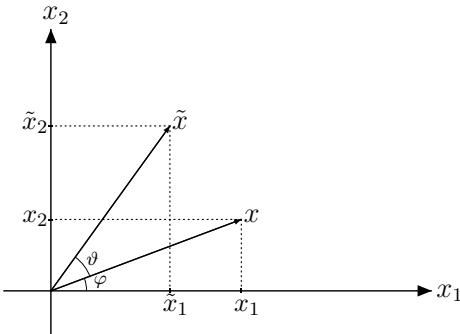
$$\tilde{x}_1 = a \cos(\vartheta + \varphi), \quad \tilde{x}_2 = a \sin(\vartheta + \varphi),$$

βλ. Σχήμα 2.1. Επομένως, έχουμε

$$\begin{aligned} \tilde{x}_1 &= a \cos \vartheta \cos \varphi - a \sin \vartheta \sin \varphi = \cos \vartheta \cdot x_1 - \sin \vartheta \cdot x_2 \\ \tilde{x}_2 &= a \sin \vartheta \cos \varphi + a \cos \vartheta \sin \varphi = \sin \vartheta \cdot x_1 + \cos \vartheta \cdot x_2, \end{aligned}$$

δηλαδή, όντως, $\tilde{x} = R(\vartheta)x$.

Εντελώς αντίστοιχα, ο πίνακας $R_{k\ell}(\vartheta) \in \mathbb{R}^{n,n}$, $1 \leq k < \ell \leq n$, με στοιχεία $(R_{k\ell}(\vartheta))_{ii} = \cos \vartheta$, για $i = k$ ή $i = \ell$, $(R_{k\ell}(\vartheta))_{ii} = 1$, διαφορετικά, $(R_{k\ell}(\vartheta))_{ij} = \sin \vartheta$, για $i = \ell$ και $j = k$, $(R_{k\ell}(\vartheta))_{ij} = -\sin \vartheta$, για $i = k$ και $j = \ell$, και όλα τα άλλα στοιχεία



Σχήμα 2.1: Περιστροφή του x κατά γωνία ϑ , $\tilde{x} = R(\vartheta)x$.

ίσα με μηδέν,

$$R_{k\ell}(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & \cos \vartheta & -\sin \vartheta & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix},$$

είναι ορθογώνιος, και όταν εφαρμοσθεί σε ένα διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$ περιστρέφει την προβολή του x στο επίπεδο που σχηματίζουν τα διανύσματα e_k και e_ℓ κατά γωνία ϑ στη θετική φορά, αφού αφήνει τις συνιστώσες x_i , για $i \neq k, \ell$, αναλλοίωτες, $\tilde{x}_i = x_i$, για $i \neq k, \ell$, και δίνει

$$\begin{cases} \tilde{x}_k = \cos \vartheta \cdot x_k - \sin \vartheta \cdot x_\ell & \text{δηλαδή} \\ \tilde{x}_\ell = \sin \vartheta \cdot x_k + \cos \vartheta \cdot x_\ell, \end{cases} \quad \begin{pmatrix} \tilde{x}_k \\ \tilde{x}_\ell \end{pmatrix} = R(\vartheta) \begin{pmatrix} x_k \\ x_\ell \end{pmatrix}.$$

Πίνακες της μορφής $R_{k\ell}(\vartheta)$, $1 \leq k < \ell \leq n$, καλούνται, για προφανείς λόγους, περιστροφές των *Givens*. Οι αντίστοιχοι μετασχηματισμοί, $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $x \mapsto R_{k\ell}(\vartheta)x$,

ονομάζονται *μετασχηματισμοί του Givens*. Οι μετασχηματισμοί του Givens μπορούν να χρησιμοποιηθούν, όπως θα δούμε στη συνέχεια, για να οδηγήσουν, όπως και οι μετασχηματισμοί του Householder, στην ανάλυση QR ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m,n}$. Για κατάλληλο ϑ , ο μετασχηματισμός $R_{k\ell}(\vartheta) \in \mathbb{R}^{m,m}$, $\ell > k$, μηδενίζει το στοιχείο στη θέση (ℓ, k) του πίνακα A . Αυτό γίνεται για κάθε στοιχείο του A κάτω από τη διαγώνιο, αρχίζοντας από την πρώτη στήλη και προχωρώντας προς τη δεύτερη κ.ο.κ.

Έστω $A \in \mathbb{R}^{m,n}$ ένας πίνακας. Υποθέτουμε ότι το στοιχείο του $a_{\ell k}$, στη θέση (ℓ, k) , είναι διάφορο του μηδενός. (Σε διαφορετική περίπτωση δεν χρειάζεται να κάνουμε κάτι, οπότε μπορούμε να θεωρήσουμε ότι πολλαπλασιάζουμε με τον πίνακα $R_{k\ell}(\vartheta) = I_m$.) Ας προσδιορίσουμε έναν πίνακα του Givens $R_{k\ell}(\vartheta) \in \mathbb{R}^{m,m}$, $\ell > k$, που μηδενίζει το στοιχείο στη θέση (ℓ, k) του A , δηλαδή τέτοιον ώστε να ισχύει $(R_{k\ell}(\vartheta)A)_{\ell k} = 0$. Αυτή η συνθήκη γράφεται στη μορφή

$$\sin \vartheta \cdot a_{kk} + \cos \vartheta \cdot a_{\ell k} = 0.$$

Αμέσως διαπιστώνουμε ότι η σχέση αυτή ικανοποιείται για

$$\sin \vartheta = -\frac{a_{\ell k}}{\sqrt{a_{kk}^2 + a_{\ell k}^2}}, \quad \cos \vartheta = \frac{a_{kk}}{\sqrt{a_{kk}^2 + a_{\ell k}^2}}$$

(καθώς και για τους αντίθετους αυτών των αριθμών).

Ας υποθέσουμε τώρα ότι, φερ' ειπείν με εφαρμογή κατάλληλων μετασχηματισμών Givens, έχουμε καταλήξει σε έναν πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m,n}$, με n γραμμικώς ανεξάρτητες στήλες, με μηδενικά στοιχεία κάτω από τη διαγώνιο στις πρώτες $k-1$ στήλες, δηλαδή στις θέσεις (i, j) , $j = 1, \dots, k-1$, $i = j+1, \dots, m$. Τότε, η εφαρμογή του μετασχηματισμού $R_{k\ell}(\vartheta)$ στον πίνακα A θα επηρεάσει μόνο δύο γραμμές του, τις γραμμές k και ℓ , την πρώτη από το στοιχείο στη θέση (k, k) και δεξιά, δηλαδή τα στοιχεία στις θέσεις $(k, k), (k, k+1), \dots, (k, n)$, ενώ τη δεύτερη, πέραν του επιδιωκόμενου μηδενισμού του στοιχείου στη θέση (ℓ, k) , στις θέσεις $(\ell, k+1), \dots, (\ell, n)$. Συγκεκριμένα, στη θέση (k, k) θα πάρουμε το στοιχείο \tilde{a}_{kk} ,

$$\tilde{a}_{kk} = \cos \vartheta \cdot a_{kk} - \sin \vartheta \cdot a_{\ell k} = \sqrt{a_{kk}^2 + a_{\ell k}^2},$$

και στις θέσεις $(k, k+1), \dots, (k, n)$ τα στοιχεία

$$\tilde{a}_{kj} = \cos \vartheta \cdot a_{kj} - \sin \vartheta \cdot a_{\ell j} = \frac{a_{kk}a_{kj} + a_{\ell k}a_{\ell j}}{\sqrt{a_{kk}^2 + a_{\ell k}^2}}, \quad j = k+1, \dots, n,$$

ενώ τα στοιχεία της γραμμής ℓ , που θα αλλάξουν, θα γίνουν

$$\tilde{a}_{\ell j} = \sin \vartheta \cdot a_{kj} + \cos \vartheta \cdot a_{\ell j} = \frac{-a_{\ell k}a_{kj} + a_{kk}a_{\ell j}}{\sqrt{a_{kk}^2 + a_{\ell k}^2}}, \quad j = k+1, \dots, n.$$

Διαδοχική εφαρμογή των μετασχηματισμών $R_{k,k+1}(\vartheta), R_{k,k+2}(\vartheta), \dots, R_{k,m}(\vartheta)$, στον πίνακα A , με κατάλληλο κάθε φορά ϑ , οδηγεί σε έναν νέο πίνακα με μηδενικά στοιχεία στη στήλη k κάτω από τη διαγώνιο (συνεπώς με μηδενικά στοιχεία κάτω από τη διαγώνιο στις πρώτες k στήλες). Η σειρά με την οποία εφαρμόζουμε τους μετασχηματισμούς για να μηδενίσουμε τα στοιχεία κάτω από τη διαγώνιο σε μια στήλη k δεν παίζει ρόλο, σε αντιδιαστολή με ότι συμβαίνει με τη σειρά που εργαζόμαστε στις στήλες, στις οποίες πρέπει να προχωρούμε από την πρώτη προς την τελευταία.

Για να οδηγηθούμε σε ανάλυση QR ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m,n}$, $m \geq n$, με περιστροφές Givens, πρέπει να εφαρμόσουμε τόσους μετασχηματισμούς Givens, όσο το πλήθος των στοιχείων που πρέπει να απαλειφθούν, δηλαδή $mn - \frac{n(n+1)}{2}$. Κατ' αυτόν τον τρόπο απαιτούνται πολύ περισσότερες πράξεις από όσες απαιτούνται με τον αντίστοιχο αλγόριθμο που βασίζεται σε ανακλάσεις του Householder. Σημειώνουμε όμως ότι οι περιστροφές Givens είναι χρήσιμες, αφού στην πλέον αποτελεσματική εκδοχή της μεθόδου QR για την προσέγγιση ιδιοτιμών πινάκων χρησιμοποιούνται συνδυασμοί μετασχηματισμών Householder και Givens. Συγκεκριμένα, σε ένα πρώτο στάδιο ανάγεται ένας πίνακας A σε έναν όμοιο του πίνακα Hessenberg B , και εν συνεχεία εφαρμόζεται η μέθοδος QR στον B και σε αυτό το δεύτερο στάδιο χρησιμοποιούνται μετασχηματισμοί Givens, βλ. την ενότητα 2.6.1.

Όσον αφορά τις απαιτούμενες θέσεις μνήμης, προφανώς για την αποθήκευση ενός πίνακα Givens $R_{k\ell}(\vartheta)$ αρκεί να αποθηκεύσουμε δύο αριθμούς, τις ποσότητες $\cos \vartheta$ και $\sin \vartheta$. Μάλιστα ένα τέχνασμα μας επιτρέπει να αποθηκεύσουμε την απαιτούμενη πληροφορία για κάθε τέτοιον πίνακα σε μία μόνο θέση μνήμης: Αν $|\sin \vartheta| \leq |\cos \vartheta|$, αποθηκεύουμε την ποσότητα $p, p = \sin \vartheta \cdot \text{sgn}(\cos \vartheta)$, ενώ σε διαφορετική περίπτωση αποθηκεύουμε την ποσότητα $p, p = \frac{\text{sgn}(\sin \vartheta)}{\cos \vartheta}$. Οι απαιτούμενες ποσότητες $\sin \vartheta$ και $\cos \vartheta$ (ή οι ποσότητες $-\sin \vartheta$ και $-\cos \vartheta$, που οδηγούν σε περιστροφή του Givens που μηδενίζει το ίδιο στοιχείο όπως και εκείνη με αντίθετο πρόσημο) μπορούν να προσδιορισθούν τώρα ως εξής: Αν $|p| \leq 1$, θέτουμε

$$\sin \vartheta = p \quad \text{και} \quad \cos \vartheta = \sqrt{1 - p^2},$$

ενώ διαφορετικά θέτουμε

$$\cos \vartheta = \frac{1}{p} \quad \text{και} \quad \sin \vartheta = \sqrt{1 - \left(\frac{1}{p}\right)^2}.$$

2.6 Η μέθοδος QR

Η αριθμητική μέθοδος QR βασίζεται στην ανάλυση QR ενός πίνακα, προτάθηκε από τον Francis το 1961, και είναι η αποτελεσματικότερη γνωστή μέθοδος για την προσέγγιση ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων πινάκων. Όπως και η μέθοδος LR , η μέθοδος QR είναι επαναληπτική.

Θεωρούμε έναν πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ και μια ανάλυσή του σε γινόμενο QR με $Q \in \mathbb{R}^{n,n}$ ορθογώνιο πίνακα και $R \in \mathbb{R}^{n,n}$ άνω τριγωνικό πίνακα. Όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο, η ανάλυση QR υπάρχει πάντα και μπορεί να υπολογισθεί τόσο με ανακλάσεις Householder όσο και με περιστροφές Givens. Θέτουμε τώρα $A_1 := A$, και, θεωρώντας μια ανάλυση QR του πίνακα A_i , $A_i = Q_i R_i$, ορίζουμε τον πίνακα A_{i+1} αλλάζοντας τη σειρά των Q_i και R_i σε αυτό το γινόμενο, δηλαδή ως εξής

$$A_{i+1} := R_i Q_i.$$

Με εντελώς αντίστοιχο τρόπο εκείνου της απόδειξης της Πρότασης 2.2 αποδεικνύεται ότι στην προκειμένη περίπτωση ισχύει το εξής προκαταρκτικό αποτέλεσμα:

Πρόταση 2.3 *Οι πίνακες A_i, Q_i και R_i , που αναφέρθηκαν προηγουμένως, καθώς και οι $P_i := Q_1 Q_2 \cdots Q_i$, $U_i := R_i R_{i-1} \cdots R_1$ έχουν τις ακόλουθες ιδιότητες:*

- a) *Οι πίνακες A_{i+1} και A_i είναι όμοιοι· συγκεκριμένα, $A_{i+1} = Q_i^T A_i Q_i$, για $i \in \mathbb{N}$.*
- b) *Μεταξύ των A_{i+1} και των A έχουμε τη σχέση*

$$A_{i+1} = (Q_1 Q_2 \cdots Q_i)^T A (Q_1 Q_2 \cdots Q_i), \quad i \in \mathbb{N}_0.$$

- c) $A^i = P_i U_i$, $i \in \mathbb{N}$. □

Δίνουμε τώρα, χωρίς απόδειξη, ένα αποτέλεσμα σύγκλισης της μεθόδου QR .

Θεώρημα 2.6 Εστω $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ ένας πίνακας τέτοιος ώστε

a) Για τις ιδιοτιμές $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ του A ισχύει

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

β) Ο πίνακας S στη σχέση $A = S^{-1}DS$, με $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, αναλύεται σε γινόμενο LU , $S = LU$.

Τότε, οι πίνακες A_m, Q_m, R_m της μεθόδου QR για τον A έχουν τις εξής ιδιότητες: Υπάρχουν πίνακες φάσης S_m , $S_m = \text{diag}(e^{i\varphi_1}, \dots, e^{i\varphi_n})$, $\varphi_1, \dots, \varphi_n \in [0, 2\pi]$, τέτοιοι ώστε

$$\lim_{m \rightarrow \infty} S_{m-1}^* Q_m S_m = I_n$$

και

$$\lim_{m \rightarrow \infty} S_m^* R_m S_{m-1} = \lim_{m \rightarrow \infty} S_{m-1} A_m S_{m-1} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * & \dots & * \\ & \ddots & \dots & * \\ & & \ddots & * \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

Ιδιαίτερα, με $A_m = (a_{ij}^{(m)})_{i,j=1,\dots,n}$, ισχύει

$$\lim_{m \rightarrow \infty} a_{ii}^{(m)} = \lambda_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

□

Παρατήρηση 2.5 Ο μόνος λόγος για την υπόθεση β) στο Θεώρημα 2.6 είναι για να εξασφαλισθεί ότι τα διαγώνια στοιχεία $a_{ii}^{(m)}$ συγκλίνουν, για $m \rightarrow \infty$, στις ιδιοτιμές λ_i διατεταγμένες κατά φθίνουσα απόλυτη τιμή. Χωρίς την υπόθεση αυτή το αποτέλεσμα εξακολουθεί να ισχύει, για κατάλληλη μετάθεση των ιδιοτιμών $\lambda_1, \dots, \lambda_n$.

□

2.6.1 Πρακτική εφαρμογή της μεθόδου QR

Στην αρχική εκδοχή της η μέθοδος QR παρουσιάζει δύο σοβαρότατα μειονεκτήματα: Αφ' ενός είναι πολύ δαπανηρή, αφού σε κάθε επανάληψη, δηλαδή στον υπολογισμό του A_{i+1} από τον A_i , στην περίπτωση ενός πυκνού $n \times n$ πίνακα A απαιτούνται

$O(n^3)$ πράξεις, αφ' ετέρου η σύγκλιση, στην περίπτωση που κάποιος από τους λόγους $|\lambda_j/\lambda_k|$ είναι κοντά στη μονάδα, είναι αργή. Και τα δύο αυτά μειονεκτήματα μπορούν να αντιμετωπισθούν.

Το πρώτο μειονέκτημα αντιμετωπίζεται ως εξής: Η μέθοδος εφαρμόζεται σε πίνακες Hessenberg, δηλαδή σε ένα πρώτο στάδιο ο αρχικός πίνακας A ανάγεται, με ανακλάσεις Householder, σε έναν πίνακα Hessenberg B και εν συνεχείᾳ η μέθοδος QR εφαρμόζεται στον B (μάλιστα, στην περίπτωση Ερμητιανού πίνακα A , ο B είναι τόσο Ερμητιανός όσο και τύπου Hessenberg, δηλαδή είναι τριδιαγώνιος). Κεντρικό ρόλο εδώ παίζει το γεγονός ότι όταν ξεκινάμε από έναν πίνακα Hessenberg A , η μέθοδος QR δίνει σε κάθε βήμα πίνακες Hessenberg, δηλαδή όλοι οι ενδιάμεσοι πίνακες A_i είναι πίνακες Hessenberg. Στην περίπτωση πινάκων Hessenberg, το βήμα $A_i \rightarrow A_{i+1}$ υλοποιείται με κατάλληλες περιστροφές Givens, και το υπολογιστικό κόστος είναι $O(n^2)$ πράξεις· μάλιστα στην περίπτωση τριδιαγώνιων πινάκων το κόστος είναι μόνο $O(n)$ πράξεις.

Σχετικά με το δεύτερο μειονέκτημα, την ενδεχόμενη αργή σύγκλιση, αναφέρουμε απλώς ότι αυτό αντιμετωπίζεται με τεχνικές μετατόπισης, εφαρμόζουμε δηλαδή τη μέθοδο σε πίνακες $A - kI_n$ με κατάλληλη παράμετρο μετατόπισης k , αντί του A . Μάλιστα, το k μπορεί να μεταβάλλεται από επανάληψη σε επανάληψη, δηλαδή στο βήμα $A_i \rightarrow A_{i+1}$ μπορεί να χρησιμοποιείται κατάλληλη παράμετρος μετατόπισης k_i . Δεν θα υπεισέλθουμε εδώ σε λεπτομέρειες.

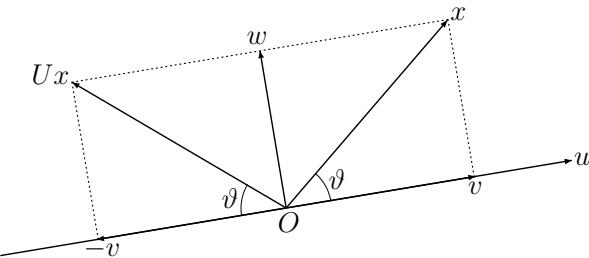
Ασκήσεις

2.1 Έστω $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ ένας διαγωνιοποιήσιμος πίνακας, $S^{-1}AS = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$. Άντοντος $\tilde{D} \in \mathbb{R}^{n,n}$ είναι ένας αντιστρέψιμος διαγώνιος πίνακας και $\tilde{S} := S\tilde{D}$, αποδείξτε ότι $\tilde{S}^{-1}A\tilde{S} = D$.

2.2 Έστω $U \in \mathbb{R}^{m,m}$ ένας μετασχηματισμός του Householder, και I_n ο μοναδιαίος $n \times n$ πίνακας. Αποδείξτε ότι ο $(n+m) \times (n+m)$ πίνακας \tilde{U} ,

$$\tilde{U} = \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix},$$

είναι μετασχηματισμός του Householder.



Σχήμα 2.2: Αποτέλεσμα πολλαπλασιασμού ενός πίνακα Householder $U, U = I - 2uu^T$, επί διάνυσμα x .

[*Υπόδειξη:* Έστω $U = I_m - 2uu^T$, $u \in \mathbb{R}^m$, $\|u\|_2 = 1$. Θέστε $\tilde{u} = (0, \dots, 0 | u^T)^T$ και θεωρήστε τον πίνακα $I_{n+m} - 2\tilde{u}\tilde{u}^T$.]

2.3 α) Έστω ότι ο πίνακας $U, U = I_n - 2u u^T$, είναι ένας μετασχηματισμός του Householder στον \mathbb{R}^n . Έστω $x \in \mathbb{R}^n$, v η προβολή του x στον μονοδιάστατο χώρο $\langle u \rangle$ και $w = x - v$. Αποδείξτε ότι $Ux = -v + w$. Δώστε γεωμετρική ερμηνεία για $n = 2$.

β) Έστω $x, y \in \mathbb{R}^n$, $n \geq 2$, δύο διαφορετικά διανύσματα με την ίδια Ευκλείδεια νόρμα. Αποδείξτε ότι υπάρχει μετασχηματισμός του Householder U τέτοιος ώστε $Ux = y$.

[*Υπόδειξη:* Θέστε $u := (x - y)/\|x - y\|_2$.]

2.4 α) Έστω A ένας $m \times n$ πραγματικός πίνακας, $m \geq n$, με γραμμικά ανεξάρτητες στήλες. Αποδείξτε, χωρίς να χρησιμοποιήσετε μετασχηματισμούς του Householder ή περιστροφές του Givens, ότι υπάρχουν μοναδικοί $m \times n$ και $n \times n$ πίνακες Q και R , αντίστοιχα, όπου ο Q έχει ορθοκανονικές στήλες και ο R είναι άνω τριγωνικός με θετικά διαγώνια στοιχεία, τέτοιοι ώστε $A = QR$.

[*Υπόδειξη:* Ο $A^T A$ είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Σύμφωνα με την ανάλυση του Cholesky, έχουμε $A^T A = R^T R$. Ορίστε $Q = AR^{-1}$.]

β) Αποδείξτε ότι ο παρακάτω αλγόριθμος των Gram–Schmidt

$$\begin{aligned} \gamma_1 a & k = 1, 2, \dots, n \\ \gamma_1 a & i = 1, \dots, k-1 \\ r_{ik} &= (q^i)^T a^k \\ q^k &= a^k - \sum_{j=1}^{k-1} r_{jk} q^j \\ r_{kk} &= \|q^k\| \\ q^k &\leftarrow \frac{1}{r_{kk}} q^k \end{aligned}$$

υπολογίζει τις στήλες q^i του Q και τα στοιχεία r_{ij} του R στην ανάλυση που αναφέρεται στο a . Τα a^i είναι οι στήλες του A . Σημειώνουμε ότι ο αλγόριθμος αυτός είναι ασταθής.

[Υπόδειξη: Αποδείξτε επαγωγικά ότι $(q^j)^T q^k = 0$, $j = 1, \dots, k-1$, και ότι τα q^k ικανοποιούν την $A = QR$.]

2.5 Έστω $U \in \mathbb{R}^{n,n}$ ένας συμμετρικός και ορθογώνιος πίνακας. Αποδείξτε ότι $U^2 = I_n$.

Βιβλιογραφία

1. Γ. Δ. Ακρίβης: *Γραμμική Άλγεβρα*. (Πανεπιστημιακές Παραδόσεις), Ιωάννινα, 2004.
2. Γ. Δ. Ακρίβης, Β. Α. Δουγαλής: *Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση*. β' αναθεωρημένη έκδοση, β' ανατύπωση, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 2006.
3. Σ. Α. Ανδρεαδάκης: *Γραμμική Άλγεβρα*. Εκδόσεις Συμμετρία, Αθήνα, 1991.
4. H. Anton: *Elementary Linear Algebra*. 4th ed., Wiley, New York, 1984.
5. Δ. Βάρσος, Δ. Δεριζιώτης, Μ. Μαλιάκας, Σ. Γ. Παπασταυρίδης, Ε. Ράπτης, Ο. Ταλέλλη: *Εισαγωγή στη Γραμμική Άλγεβρα*. Εκδόσεις Σοφία, Θεσσαλονίκη, 2003.
6. B. Δουγαλής, Δ. Νούτσος, A. Χατζηδήμος: *Σημειώσεις Αριθμητικής Γραμμικής Άλγεβρας*. Ιωάννινα, 2006.
7. G. Fischer: *Lineare Algebra*. 14th ed., rororo vieweg, Rowohlt, Reinbek, 2003.
8. W. Greub: *Linear Algebra*. 3rd ed., Springer–Verlag, New York, 1967.
9. G. Hadley: *Linear Algebra*. 3rd printing, Addison–Wesley, Reading, 1973.
10. W. Nef: *Lehrbuch der Linearen Algebra*. Birkhäuser Verlag, Basel, 1966.
11. J. Stoer, R. Bulirsch: *Introduction to Numerical Analysis*. 3rd ed., Springer–Verlag, New York, 2002.
12. G. Strang: *Linear Algebra and its Applications*. 3rd ed., Harcourt Brace Jovanovich Publishers, 1988. (Ελληνική μετάφραση με τίτλο *Γραμμική Άλγεβρα και Εφαρμογές*. γ' έκδοση, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 1999.)
13. H. Zieschang: *Lineare Algebra und Geometrie*. Teubner, Stuttgart, 1997.

