Zad. 8. Wyznaczanie wartości własnych macierzy metodą QR

e-mail: andrzej.kedziorski@fizyka.umk.pl
tel.: 56611-3274
pokój: 485B
http://www.fizyka.umk.pl/~tecumseh/EDU/MNII/

Zadanie 8

Napisz program wyznaczający wszystkie wartości własne macierzy kwadratowej $\mathbf{A}$ metodą QR.

Uwaga: w tym zadaniu pojawia się nazwa QR w kontekście dwóch metod

(1) Iteracyjna metoda QR do wyznaczania wartości własnych macierzy
(2) Rozkład QR macierzy

Przy czym metoda QR (1) korzysta z rozkładu QR (2)

Zagadnienie własne

- Równanie własne macierzy kwadratowej $n \times n$

$$\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x} \quad \Leftrightarrow \quad (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{1})\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

  $\mathbf{x}$ wektor własny ($n \times 1$), λ - wartość własna (liczba, w ogólności może być zespolona)

- Wartości własne λ są pierwiastkami wielomianu charakterystycznego, tzn.

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{1}) = 0$$

- W szczególności, jeżeli $\mathbf{A} = \mathbf{U}$, to

$$\det(\mathbf{U} - \lambda\mathbf{1}) = (u_{11} - \lambda)(u_{22} - \lambda)...(u_{nn} - \lambda) = 0$$

  co oznacza, że $\lambda_i = u_{ii}$, gdzie $i = 1, ..., n$

Macierze podobne

- Def. Macierze $\mathbf{A}$ i $\mathbf{B}$ są podobne $\Leftrightarrow \exists \mathbf{C}\ \mathbf{B} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{C}$, gdzie $\det \mathbf{C} \neq 0$
- Tw. Macierze podobne mają te same wartości własne
  Dowód:

$$
\begin{aligned}
& \mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x} \\
\mathbf{C}^{-1} \cdot | \quad & \mathbf{A}\mathbf{1}\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x} \\
& \mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}(\mathbf{C}\mathbf{C}^{-1})\mathbf{x} = \mathbf{C}^{-1}\lambda \mathbf{x} \\
& (\mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{C})(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{x}) = \lambda(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{x}) \\
& \mathbf{B}\mathbf{x}' = \lambda \mathbf{x}',
\end{aligned}
$$

gdzie $\mathbf{x}' = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{x}$

Macierze ortogonalne - przypomnienie

- Def. Macierz $\mathbf{Q}$ $n \times n$ jest ortogonalna $\Leftrightarrow$

$$\mathbf{Q}\mathbf{Q}^{Tr} = \mathbf{Q}^{\mathbf{Tr}}\mathbf{Q} = \mathbf{1},$$

  tzn. $\mathbf{Q}^{Tr} = \mathbf{Q}^{-1}$

- Element macierzy $(\mathbf{Q}\mathbf{Q}^{Tr})_{ij}$

$$(\mathbf{Q}\mathbf{Q}^{Tr})_{ij} = \sum_{k=1}^{n} \mathbf{Q}_{ik}(\mathbf{Q}^{Tr})_{kj} = \sum_{k=1}^{n} \mathbf{Q}_{ik}\mathbf{Q}_{jk} = \delta_{ij}$$

  Wiersze macierzy ortogonalnej są wzajemnie ortonormalne

- Element macierzy $(\mathbf{Q}^{\mathbf{Tr}}\mathbf{Q})_{ij}$

$$(\mathbf{Q}^{\mathbf{Tr}}\mathbf{Q})_{ij} = \sum_{k=1}^{n} (\mathbf{Q}^{Tr})_{ik}\mathbf{Q}_{kj} = \sum_{k=1}^{n} \mathbf{Q}_{ki}\mathbf{Q}_{kj} = \delta_{ij}$$

  Kolumny macierzy ortogonalnej są wzajemnie ortonormalne

Metoda QR wyznaczanie wartości własnych macierzy

- Tw. Jeżeli macierz kwadratowa **A** o elementach rzeczywistych i wymiarach $n \times n$ posiada n różnych wartości własnych, tzn. $|\lambda_1| > |\lambda_2| > ... > |\lambda_n|$, to wtedy $\mathbf{A_k}$ zbiega do macierzy trójkątnej górnej, gdzie

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_1 &= \mathbf{A}\\ \mathbf{A}_k &= \mathbf{Q}_k\mathbf{R}_k \quad \text{rozkład QR}\\ \mathbf{A}_{k+1} &= \mathbf{R}_k\mathbf{Q}_k\end{aligned}$$

  $\mathbf{Q}_k$ - macierz ortogonalna, $\mathbf{R}_k$ - macierz trójkątna górna
- $\mathbf{A}_k$ i $\mathbf{A}_{k+1}$ są macierzami podobnymi

$$\mathbf{Q}_k^{-1} \cdot | \quad \mathbf{A}_k = \mathbf{Q}_k\mathbf{R}_k \quad \Rightarrow \quad \mathbf{R}_k = \mathbf{Q}_k^{Tr}\mathbf{A}_k$$

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{R}_k\mathbf{Q}_k = \mathbf{Q}_k^{Tr}\mathbf{A}_k\mathbf{Q}_k$$

  Macierze $\mathbf{A}_k$, k=1,2,..., mają te same wartości własne (co **A**)
- Jeżeli macierz o elementach rzeczywistych **A** jest symetryczna, to $\mathbf{A}_k$ zbiega do macierzy diagonalnej

Rozkład $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$

Procedura korzystająca z transformacji Hauseholdera

- Tworzymy kolejne macierze $\mathbf{A}^{(1)}$, $\mathbf{A}^{(2)}$, … $\mathbf{A}^{(n)}$

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}$$
$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{Q}^{(k)}\mathbf{A}^{(k)}, \quad k = 1, 2, \ldots, n-1.$$

- Symetryczną i ortogonalną macierz Hauseholdera $\mathbf{Q}^{(k)}$

$$\mathbf{Q}^{(k)} = \mathbf{1} - 2\mathbf{x}^{(k)}(\mathbf{x}^{(k)})^{Tr}, \quad (\mathbf{x}^{(k)})^{Tr}\mathbf{x}^{(k)} = 1$$
$$Q_{ij}^{(k)} = \delta_{ij} - 2x_i^{(k)}x_j^{(k)}, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n$$

  wyznaczamy z warunku

$$A_{ik}^{(k+1)} = 0, \quad i = k+1, \ldots, n$$

- $\mathbf{x}^{(k)}$ jest wektorem (kolumną $n \times 1$)
- Macierz $\mathbf{A}^{(k+1)}$ ma zera poniżej diagonali w k początkowych kolumnach

G. Golub, W. Kahan, *Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix*, J. SIAM Numer. Anal. B 2, 205-224 (1965).

Przykład $\mathbf{A}^{(6)}$ - macierz prawie trójkątna górna

$$\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}_{8\times 8}$$

G. Golub, W. Kahan, *Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix*, J. SIAM Numer. Anal. B 2, 205-224 (1965).

Rozkład $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$

Wyznaczenie wektora jednostkowego $\mathbf{x}^{(k)}$

$$s_k = \sqrt{\sum_{i=k}^{n} |A_{ik}^{(k)}|^2}$$

$$x_i^{(k)} = 0, \quad i < k$$

$$x_k^{(k)} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{|A_{kk}^{(k)}|}{s_k}\right)}$$

$$x_i^{(k)} = c_k\, A_{i,k}^{(k)}, \quad i = k+1, \ldots, n$$

gdzie

$$c_k = \frac{\operatorname{sign}(A_{kk}^{(k)})}{2 s_k\, x_k^{(k)}}$$

Jeżeli $s_k = 0$, wtedy $\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{0}$

G. Golub, W. Kahan, *Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix*, J. SIAM Numer. Anal. B 2, 205-224 (1965).

Rozkład $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}$$

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{Q}^{(k)}\mathbf{A}^{(k)}, \quad k = 1, 2, \ldots, n-1$$

$$\Downarrow$$

Macierz ortogonalna

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^{(1)}\,\mathbf{Q}^{(2)} \ldots \mathbf{Q}^{(n-1)}$$

Macierz trójkątna górna

$$\mathbf{R} = \mathbf{A}^{(n)}$$

G. Golub, W. Kahan, *Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix*, J. SIAM Numer. Anal. B 2, 205-224 (1965).

Metoda QR znajdowania wartości własnych

- Algorytm

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}_1 &= \mathbf{A} \\
\mathbf{A}_k &= \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_k \\
\mathbf{A}_{k+1} &= \mathbf{R}_k \mathbf{Q}_k
\end{aligned}
$$

- Warunek na zakończenie iteracji?
  - $\mathbf{A_{k+1}}$ jest macierzą trójkątną górną
  - Diagonalne elementy $\mathbf{A_k}$ i $\mathbf{A_{k+1}}$ są takie same
  - Tak naprawdę całe macierze $\mathbf{A_k}$ i $\mathbf{A_{k+1}}$ są takie same
  - Oznacza to, że $\mathbf{Q_k}$ jest macierzą o elementach $(\mathbf{Q_k})_{ij} = \pm\delta_{ij}$

  W praktyce powyższe warunki są spełnione w przybliżeniu
- Wartości własne $\mathbf{A}$, to elementy diagonalne macierzy trójkątnej górnej $\mathbf{A_{k_{max}}}$
- Jeżeli $\mathbf{A}$ jest macierzą symetryczną, to $\mathbf{A}_k$ jest diagonalna, a kolumny macierzy ortogonalnej $\mathbf{Q} = \mathbf{Q_1 Q_2 \ldots Q_{k_{max}}}$ są wektorami własnymi macierzy $\mathbf{A}$ przy kolejnych wartościach własnych $\lambda_i = (\mathbf{A}_k)_{ii}$, tzn.

$$\mathbf{A q_i} = \lambda_\mathbf{i} \mathbf{q_i},$$

gdzie $\mathbf{q_i}$ jest i-tą kolumną macierzy $\mathbf{Q}$

Do zrobienia

1. Wczytać macierz $\mathbf{A}$ o wymiarach $n \times n$ i elementach rzeczywistych
2. Wyznaczać kolejne $\mathbf{A}_{k+1}$ dokonując za każdym rozkładu QR macierzy $\mathbf{A}_k$
3. Sprawdzać, czy $\mathbf{Q_k R_k} = \mathbf{A_k}$
4. Wprowadzić warunki na przerwanie iteracji
5. Wyznaczyć wartości własne dla macierzy symetrycznej i niesymetrycznej
6. Zbadać zbieżność metody dla macierzy, która ma przynajmniej dwie takie same wartości własne
7. Porównać z wynikami istniejących funkcji (np. eig() w Matlabie)

Przykłady

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

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 5 \\ 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 4 & 5 & 6 \\ 5 & 5 & 6 & 8 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 13 & -14 & 3 \\ -2 & 25 & -22 & 4 \\ -3 & 31 & -27 & 5 \\ -2 & 34 & -32 & 7 \end{pmatrix}$$

Rozkład QR - inne podejście

- Kolumny

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a_1}\ \mathbf{a_2}\ \ldots\ \mathbf{a_n}] \quad \mathbf{Q} = [\mathbf{q_1}\ \mathbf{q_2}\ \ldots\ \mathbf{q_n}],$$

  gdzie $\mathbf{a}_k$ i $\mathbf{q}_k$ - k-te kolumny $(n \times 1)$ macierzy $\mathbf{A}$ i $\mathbf{Q}$

- Norma wektora

$$\|\mathbf{v}\| = \|\mathbf{v}\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^{n} v_j^2}$$

  W szczególności $\|\mathbf{a}_k\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} a_{ik}^2}$

- Iloczyn skalarny wektorów

$$\mathbf{u}^{\mathbf{Tr}}\mathbf{v} = \sum_{j=1}^{n} u_j v_j$$

  W szczególności $\mathbf{q_k^{Tr} a_i} = \sum_{j=1}^{n} q_{jk} a_{ji}$

Rozkład QR - algorytm (mniej stabilny[1])

- Ortogonalizacja Grama-Schmidta kolumn macierzy $\mathbf{A}$, tzn. $\{\mathbf{a}_k\} \to \{\mathbf{q}_k\}$, gdzie $\mathbf{q_i}^{\mathbf{Tr}}\mathbf{q_j} = \delta_{ij}$
  1. $\mathbf{q_1} = \frac{\mathbf{a_1}}{\|\mathbf{a_1}\|}$
  2. $i = 2, \ldots n$

$$\mathbf{a_i'} = \mathbf{a_i} - \sum_{k=1}^{i-1} (\mathbf{q_k}^{\mathbf{Tr}}\mathbf{a_i})\mathbf{q_k}$$

$$\mathbf{q_i} = \frac{\mathbf{a_i'}}{\|\mathbf{a_i'}\|}$$

- Ortogonalna macierz $\mathbf{Q}$

$$\mathbf{Q} = [\mathbf{q_1}\ \mathbf{q_2}\ \ldots\ \mathbf{q_n}]$$

- Macierz trójkątna górna $\mathbf{R}$

$$r_{ii} = \|\mathbf{a_i'}\|,\ \ i = 1, \ldots, n$$
$$r_{ij} = \mathbf{q_i}^{\mathbf{Tr}}\mathbf{a_j},\ \ i < j$$
$$r_{ij} = 0,\ \ i > j$$

[1] Np. nie nadaje się dla macierzy osobliwych, czyli mających przynajmniej jedną wartość własną równą zero; ale są też inne problemy