Pokročilé numerické metody I
Numerický výpočet vlastních čísel

Jiří Zelinka

Základní pojmy, vlastnosti a vztahy

A je komplexní čtvercová matice typu $n \times n$.

- vlastní číslo, vlastní vektor matice, $\lambda(A)$ – spektrum
- invariantní podprostor (invariant) matice
- A je reducibilní (rozložitelná) matice, pokud existuje permutační matice P, že $PAP^T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{pmatrix}$, kde T_{11} a T_{22} jsou čtvercové, jinak se nazývá ireducibilní.
- Matice v Hessenbergově tvaru se nazývá redukovaná, pokud některý její prvek pod hlavní diagonálou je nulový, v opačném případě se nazývá neredukovaná.
- Redukovaná matice je reducibilní, tedy ireducibilní je neredukovaná.

Věta 1 Ireducibilní matice v horním Hessenbergově tvaru má všechna vlastní čísla geometrické násobnosti 1.

Lemma Jestliže $AX = XB$ (X: $n \times p$, B: $p \times p$), pak $\mathcal{R}(X)$ je invariantem A a pro $By = \lambda y$ (vlastní číslo a vektor B) platí $A(Xy) = \lambda(Xy)$. Odtud plyne, že pokud má X nezávislé sloupce, je $\lambda(B) \subseteq \lambda(A)$.
Naopak, pokud je V invariantem A, $\dim(V) = p$, pak existují matice X a B, že $AX = XB$.

Důkaz

První část vyjde přímým výpočtem. Pro důkaz druhé části stačí vzít matici X, jejíž sloupce tvoří bázi prostoru V.

Lemma

Nechť $AX = XB$ (X: $n \times p$, B: $p \times p$), $r(X) = p$. Pak existuje unitární matice Q, že

$$Q^*AQ = T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{pmatrix},$$

kde $\lambda(T_{11}) = \lambda(A) \cap \lambda(B) = \lambda(B)$.

Důkaz je založen na QR rozkladu matice X: $X = Q \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}$ pro regulární matici R_1. Zbytek vyjde přímým výpočtem.

Věta 2 (Schurův rozklad)
Buď A komplexní čtvercová matice řádu n. Pak existuje unitární matice Q, že

$$Q^*AQ = T = D + N,$$

kde $D = diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ a N je striktně horní trojúhelníková. Navíc lze Q zvolit tak, aby vlastní čísla byla v určeném pořadí.

Důkaz indukcí

Pro $n = 1$ je tvrzení zřejmé.
Pro obecné n, dané vlastní číslo λ_1 a příslušný vlastní vektor v_1 využijeme předchozí lemma ($X = v_1,\ B = \lambda_1$). Tedy existuje unitární matice Q_1, že $Q_1^* A Q_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & u^* \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}$. Použijeme indukční předpoklad na A_2 a přímým výpočtem vyjde tvrzení.

Poznámky

- Sloupce Q q_i se někdy nazývají *Schurovy vektory*.
- Z rovnosti $AQ = QT = Q(D + N)$ plyne $Aq_k = \lambda_k q_k + \sum_{i=1}^{k-1} n_{ik} q_i$ pro $k = 1 \dots, n$, takže prostory $S_k = \mathcal{L}(q_1, \dots, q_k)$ jsou invarianty.
- Dále q_k je vlastní vektor A, pokud k-tý sloupec N je nulový.

- Pokud je matice N nulová, je T diagonální a dá se ukázat (viz následující důsledek) že platí $A^*A = AA^*$, pak se A nazývá *normální*.

Důsledek

Matice A je normální právě tehdy, když existuje unitární matice Q, že

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

Důkaz

Z uvedené diagonalizace dostaneme normalitu přímým výpočtem.
Z normality A vyjde jednoduše normalita matice T.
Porovnáním členů u T^*T a TT^* vyjde, že T musí být diagonální. Například porovnáním prvku na prvním řádku a v prvním sloupci vyjde, že první řádek T je nulový (s výjimkou diagonálního prvku). Podobně postupujeme dále.

Pro reálnou matici A se snažíme pracovat v reálném oboru i v případě komplexních vlastních čísel. Platí následující obdoba Schurovy věty:

Věta 3 (Reálný Schurův rozklad)
Buď A reálná čtvercová matice řádu n. Pak existuje ortogonální matice Q, že

$$Q^T A Q = T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1m} \\ 0 & T_{22} & \cdots & T_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & T_{mm} \end{pmatrix},$$

kde T je blokově horní trojúhelníková matice a bloky na hlavní diagonále jsou řádu 1 obsahující reálná vlastní čísla matice A, nebo řádu 2, jejichž vlastní čísla jsou komplexně sdružená vlastní čísla matice A.

Důkaz je veden podobně jako pro komplexní případ, ale v lemmatu, z něhož důkaz vychází, je potřeba najít reálnou matici X se dvěma sloupci, která odpovídá dvojici komplexně sdružených vlastních čísel, tedy i příslušným vlastním vektorům.

Nechť $\lambda_1,\ \lambda_2$ jsou vlastní čísla, $\bar{\lambda}_1 = \lambda_2$. Pro příslušné vlastní vektory platí $\bar{v}_1 = v_2$. Položme $w_1 = v_1 + v_2$, $w_2 = i(v_1 - v_2)$,

$X = [w_1, w_2] = [v_1, v_2] \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} = [v_1, v_2]Y$. Pak

$AX = A[w_1, w_2] = A[v_1, v_2]Y = [\lambda_1 v_1, \lambda_2 v_2]Y =$

$= [v_1, v_2] \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} Y = [w_1, w_2]Y^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} Y.$

Takže $AX = XB$ pro

$$B = Y^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} Y = \begin{pmatrix} Re(\lambda_1) & -Im(\lambda_1) \\ Im(\lambda_1) & Re(\lambda_1) \end{pmatrix}.$$

Poloha vlastních čísel

Věta 4 (Geršgorinova věta)
Nechť $A = (a_{i,j})$ je čtvercová matice, a nechť R_i označuje uzavřený kruh se středem v $a_{i,i}$ a poloměrem $\sum_{j \neq i} |a_{i,j}|$. Pak všechna vlastní čísla matice A leží v množině $R = \bigcup_{i=1}^{n} R_i$.

Poznámka

Kruhy R_i s nazývají Geršgorinovy kruhy.

Věta 5
Sjednocení libovolných k Geršgorinových kruhů, které mají prázdný průnik se zbylými $n - k$ kruhy, obsahuje přesně k vlastních čísel včetně násobností.

Mocninná metoda

Definice (Dominantní vlastní číslo)

Vlastní číslo λ matice A se nazývá *dominantní*, jestliže pro každé jiné vlastní číslo μ platí $|\lambda| > |\mu|$. Příslušný vlastní vektor se nazývá *dominantní* vlastní vektor.

Poznámka

Pro reálnou matici musí být dominantní vlastní číslo reálné.

Věta 6 (mocninná metoda)
Buď λ_1 dominantní vlastní číslo matice A a v_1 příslušný dominantní vlastní vektor. Dále nechť u je libovolný vektor, který má nenulovou složku ve směru vektoru v. Pak

$$\lim_{k\to\infty} \frac{1}{\lambda_1^k} A^k u = c v_1$$

pro nenulovou konstantu c.

Důkaz

Pokud lze A diagonalizovat, tvoří vlastní vektory $v_1, v_2, \ldots, v_n$ (sloupce V) bázi celého prostoru. Vektor u vyjádříme v této bázi a tvrzení vyjde přímým výpočtem.

V obecném případě využijeme Jordanův kanonický tvar:

$$A = VJV^{-1},\ A^k = VJ^kV^{-1} \text{ pro}$$

$$J = \begin{pmatrix} \lambda_1 & o^T \\ o & J_2 \end{pmatrix},\ J^k = \begin{pmatrix} \lambda_1^k & o^T \\ o & J_2^k \end{pmatrix}.$$

Matice J_2^k je blokově diagonální s k-tými mocninami příslušných Jordanových bloků na diagonále.

Pro

$$J_i = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & 0 & o^T \\ 0 & \lambda_i & 1 & o^T \\ \vdots & & \ddots & \ddots \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_i \end{pmatrix} \text{ je}$$

$$J_i^k = \begin{pmatrix} \lambda_i^k & \binom{k}{1}\lambda_i^{k-1} & \binom{k}{2}\lambda_i^{k-2} & \binom{k}{3}\lambda_i^{k-3} & \cdots \\ 0 & \lambda_i^k & \binom{k}{1}\lambda_i^{k-1} & \binom{k}{2}\lambda_i^{k-2} & \cdots \\ \vdots & & \ddots & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ \vdots & & & & \ddots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \lambda_i^k \end{pmatrix},$$

odkud plyne, že

$$\lim_{k\to\infty} \frac{1}{\lambda_1^k} J_2^k = 0.$$

Matici V zapišme blokově jako (v_1, V_2). Vektor u vyjádříme v bázi tvořené sloupci V: $u = Vx$. Pak

$$\lim_{k\to\infty} \frac{1}{\lambda_1^k} A^k u = \lim_{k\to\infty} \frac{1}{\lambda_1^k} VJ^k V^{-1} Vx = V \lim_{k\to\infty} \frac{1}{\lambda_1^k} J^k x =$$

$$= (v_1, V_2) \left(\begin{array}{cc} 1 & o^T \\ o & 0_{n-1} \end{array} \right) x = x_1 v_1.$$

Důsledek

Pokud je λ_2 vlastní číslo s druhou největší absolutní hodnotou, závisí rychlost konvergence na poměru $|\lambda_2/\lambda_1|$ v tom smyslu, že chyba se blíží k nule zhruba jako mocniny tohoto výrazu.

Algoritmy mocninné metody

Pomocí normy $\|\cdot\|_\infty$

Zvolme x_0 (např. $(1,\dots,1)^T$), pro $k = 1, 2, \dots$ položíme

1. $\tilde{x}_k = Ax_{k-1}$
2. $\lambda_1^{(k)} = \tilde{x}_{k_i}$, kde $|\tilde{x}_{k_i}| = \|\tilde{x}_k\|_\infty$ (prvek, jehož absolutní hodnota je maximální)
3. $x_k = \pm\frac{\tilde{x}_k}{\|\tilde{x}_k\|_\infty}$ (prvek v absolutní hodotě maximální je 1).

Algoritmus končíme zpravidla, pokud $|\lambda_1^{(k)} - \lambda_1^{(k-1)}|$ je dostatečné malá.

Pomocí normy $\|\cdot\|_2$

Zvolme $x_0 = u$, pro $k = 1, 2, \dots$ položíme

1. $\tilde{x}_k = Ax_{k-1}$
2. $x_k = \tilde{x}_k / \|\tilde{x}_k\|_2$
3. $\lambda_1^{(k)} = x_k^* A x_k$,

Končíme, pokud $|\lambda_1^{(k)} - \lambda_1^{(k-1)}|$ je dostatečné malá.

Mocninná metoda s posunem

c – vhodná konstanta

1. $\tilde{x}_k = (A - cI)x_{k-1}$
2. $\lambda_k = \tilde{x}_{k_i} + c$, kde $|\tilde{x}_{k_i}| = \|\tilde{x}_k\|_\infty$ (prvek, jehož absolutní hodnota je maximální)
3. $x_k = \frac{\tilde{x}_k}{\|\tilde{x}_k\|_\infty}$ (prvek v absolutní hodotě maximální je ± 1).

Využití: urychlení konvergence, změna dominance.

Metoda Rayleighových podílů

Věta 7

Buď λ_1 dominantní vlastní číslo a v_1 dominantní vlastní vektor, u je libovolný vektor, který není kolmý k v_1, x_0 má nenulovou složku ve směru vektoru v_1 a $x_{k+1} = Ax_k$. Pak platí

$$\lim_{k\to\infty} \frac{(x_{k+1}, u)}{(x_k, u)} = \lambda_1.$$

Důkaz je založen na rovnosti $\frac{(x_{k+1},u)}{(x_k,u)} = \frac{\lambda_1\left(\frac{1}{\lambda_1^{k+1}}x_{k+1},u\right)}{\left(\frac{1}{\lambda_1^k}x_k,u\right)}$.

Důsledek

$$\lim_{k\to\infty} \frac{(x_{k+1}, x_k)}{(x_k, x_k)} = \lambda_1.$$

Poznámka

Výrazy $\frac{(x_{k+1},x_k)}{(x_k,x_k)}$ se nazývají Rayleighovy podíly. Platí $(x_{k+1}, x_k) = x_k^* A x_k$, viz též 2. algoritmus mocninné metody.

Algoritmus metody Rayleighových podílů

Položme $x_0 = u$, zpravidla $x_0 = (1, \ldots, 1)^T$. Pak pro $k = 1, 2, \ldots$ položíme

1. $x_k = \frac{Ax_{k-1}}{\|x_{k-1}\|}$
2. $\lambda_1^{(k)} = \frac{(x_k, x_{k-1})}{(x_{k-1}, x_{k-1})}$

Algoritmus končíme zpravidla, pokud $|\lambda_1^{(k)} - \lambda_1^{(k-1)}|$ je dostatečné malá.

Redukce dimenze matice

Věta 8

Nechť $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ jsou vlastní čísla matice A, násobnost λ_1 je 1 a v_1 je příslušný vlastní vektor. Dále nechť x je vektor, pro který platí $(x, v_1) = 1$. Pak matice

$$B = A - \lambda_1 v_1 x^*$$

má vlastní čísla $0, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ a v_1 je vlastní vektor příslušný 0.

Důkaz

Předpoklad $(x, v_1) = 1$ se dá zapsat ve tvaru $v_1^* x = x^* v_1 = 1$. Odtud jednoduchým výpočtem dostaneme $Bv_1 = o = 0v_1$, takže v_1 je vlastní vektor matice B pro vlastní číslo 0. Pro důkaz, že ostatní vlastní čísla matic A a B jsou stejná využijeme Jordanův kanonický tvar:

$$A = VJV^{-1} \Rightarrow J = V^{-1}AV \text{ pro } J = \begin{pmatrix} \lambda_1 & o^T \\ o & J_2 \end{pmatrix}.$$

Matici V zapišme blokově jako (v_1, V_2). Jelikož $V^{-1}V$ je jednotková matice, platí $V^{-1}v_1 = e_1$. Pak

$$V^{-1}BV = V^{-1}AV - \lambda_1 V^{-1}v_1 x^* V = J - \lambda_1 e_1(x^* v_1, x^* V_2) =$$

$$= J - \lambda_1 e_1(1, x^* V_2) = J - \lambda_1 \begin{pmatrix} 1 & x^* V_2 \\ o & 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -\lambda_1 x^* V_2 \\ o & J_2 \end{pmatrix}$$

Výsledná matice je podobná matici B (není v Jordanově kanonickém tvaru), má s ní tedy stejná vlastní čísla, ta jsou ale až na λ_1 stejná jako pro matici A, protože pravý dolní blok J_2 je u obou matic stejný.

Věta 9

Buď B a x matice a vektor z předchozí věty. Buďte $v_1, u_2, \dots, u_n$ vlastní vektory matice B. Pak pro $i = 2, \dots, n$ jsou $v_i = (\lambda_i - \lambda_1)u_i + \lambda_1(x^* u_i)v_1$ vl. vektory A příslušné λ_i.

Důkaz

Tvrzení dokážeme přímým výpočtem. Pro vlastní vektor u_i matice B spočítáme nejprve

$$Au_i = (B + \lambda_1 v_1 x^*)u_i = Bu_i + \lambda_1 v_1 x^* u_i = \lambda_i u_i + \lambda_1(x^* u_i)v_1.$$

Pak

$$\begin{aligned}
&A[(\lambda_i - \lambda_1)u_i + \lambda_1(x^* u_i)v_1] = \\
&= (\lambda_i - \lambda_1)[\lambda_i u_i + \lambda_1(x^* u_i)v_1] + \lambda_1(x^* u_i)Av_1 = \\
&= \lambda_i(\lambda_i - \lambda_1)u_i + \lambda_i\lambda_1(x^* u_i)v_1 - \lambda_1^2(x^* u_i)v_1 + +\lambda_1^2(x^* u_i)v_1 = \\
&= \lambda_i[(\lambda_i - \lambda_1)u_i + \lambda_1(x^* u_i)v_1].
\end{aligned}$$

Tím je důkaz u konce.

Problém k zamyšlení: jak vyjádřit vlastní čísla matice B z vlastních čísel matice A.

Wielandtova redukce

Věta 10

Buď v_{1_k} a $(a_{k,1}, \dots, a_{k,n})$ k-tý prvek vektoru v_1, resp. k-tý řádek matice A. Vektor

$$x = \frac{1}{\lambda_1 v_{1_k}} (a_{k,1}, \dots, a_{k,n})^*$$

splňuje předpoklady věty o redukci dimenze, t.j. $(v_1, x) = 1$.

Důsledek

Při aplikaci Wielandtovy redukce má matice B nulový k-tý řádek, takže můžeme zmenšit její dimenzi vypuštěním k-tého řádku i sloupce.

Věta 11

Nechť $A = (a_{i,j})$ je čtvercová matice, položme $A_0 = A$. Dále nechť

$$A_0 = Q_0 R_0$$

je QR rozklad matice A, položme

$$A_1 = R_0 Q_0$$

a obecně pro

$$A_k = Q_k R_k$$

položme

$$A_{k+1} = R_k Q_k.$$

Pak všechny matice A_k jsou podobné matici A. Pokud je A v Hessenbergově tvaru, platí totéž i pro A_k.

Důkaz Podobnost dostaneme přímým výpočtem. Druhá část plyne z toho, že pro matici A_k v Hess. tvaru je matice Q v QR rozkladu také v Hess. tvaru (viz Givensova rotace).

Poznámka

Uvedený postup se nazývá QR algoritmus.

Věta 12

Nechť A je regulární matice, která má všechna vlastní čísla v absolutní hodnotě různá a nehchť $A = Y^{-1} diag(\lambda_1, \cdots \lambda_n) Y$ je její diagonalizace. Dále nechť existuje LU rozklad matice Y. Potom QR algoritmus konverguje k horní trojúhelníkové matici s vlastními čísly $\lambda_1, \cdots \lambda_n$ na diagonále.

Poznámka

Pokud reálná matice splňuje předpoklady předchozí věty, pak má jen reálná vlastní čísla.

Věta 13

Nechť A je regulární matice v Hessenbergově tvaru, která má všechna vlastní čísla v absolutní hodnotě různá. Pak QR algoritmus konverguje k horní trojúhelníkové matici s vlastními čísly matice A na diagonále.

QR algoritmus s posunutím

Posunutím se změní vlastní čísla, což může mít vliv na konvergenci.

Algoritmus:

A_0 – matice v Hessenbergově tvaru. Uděláme QR rozklad matice $A_0 - \mu_0 I$:

$$A_0 - \mu_0 I = Q_0 R_0,$$

pak položme

$$A_1 = R_0 Q_0 + \mu_0 I$$

a obecně pro

$$A_k - \mu_k I = Q_k R_k$$

položme

$$A_{k+1} = R_k Q_k + \mu_k I.$$

Věta 14

Všechny matice A_k jsou podobné matici A: $A_{k+1} = Q_k^* A_k Q_k$.

Věta 15

Nechť A je neredukovaná matice řádu n v Hessenbergově tvaru. Pak pro matici R určenou QR rozkladem $A = QR$ platí $r_{i,i} \neq 0$ pro $i < n$

Důkaz plyne ihned z Givensovy rotace.

Důsledek 1

Za předpokladů předchozí věty a pro singulární matici A platí $r_{n,n} = 0$.

Důsledek 2

Pokud za předpokladů předchozí věty je λ vlastní číslo matice A,

$$A - \lambda I = QR, B = RQ + \lambda I$$

(viz QR algoritmus s posunutím), je poslední řádek matice B ve tvaru $(0, \dots, 0, \lambda)$.

Rayleighovo posunutí: $\mu_k = a_{nn}^k$

Poznámka

Pokud nastane v QR algoritmu situace z předchozího důsledku, můžeme snížit řád matice vypuštěním posledního řádku a sloupce – tzv. *deflace*. Totéž můžeme provést, pokud v předposledním sloupci na posledním řádku je v absolutní hodnotě menší, než stanovená hranice, pod níž považujeme čísla za nulová.

Podobně lze rozdělit matici na dvě menší submatice (tzv. *oddělení* (decoupling)), jestliže se malé číslo objeví někde jinde pod hlavní diagonálou, takže matici lze považovat za redukovanou.

Wilkinsonovo posunutí

Nechť A_k je matice z posloupnosti vytvořené QR algoritmem s posunutím, položme $m = n - 1$. Wilkinsonovo posunutí je dáno vlastním číslem λ submatice $\tilde{A}$ tvořené m-tým a n-tým řádkem a stejnými sloupci matice A_k, které je bližší a_{nn}^k.

Pro přehlednější zápis počítejme s $n = 2$: $\tilde{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$.

Charakteristický polynom: $\psi(\lambda) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} =$
$\lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$.

$D = (a_{11} + a_{22})^2 - 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) =$

$(a_{11} - a_{22})^2 + 4a_{12}a_{21} = 4(\delta^2 + a_{12}a_{21})$,

$\delta = \frac{a_{11} - a_{22}}{2}$.

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\left(a_{11} + a_{22} \pm 2\sqrt{\delta^2 + a_{12}a_{21}}\right) =$$
$$= \frac{a_{11}+a_{22}}{2} \pm \sqrt{\delta^2 + a_{12}a_{21}} = a_{22} + \delta \pm \sqrt{\delta^2 + a_{12}a_{21}}.$$

Bližší vlastní číslo k číslu a_{22} je to, u něhož vybereme znaménko opačné, než je u δ.

$$\lambda_1 = a_{22} + sign(\delta)|\delta| - sign(\delta)\sqrt{\delta^2 + a_{12}a_{21}} =$$
$$= a_{22} + sign(\delta)(|\delta| - \sqrt{\delta^2 + a_{12}a_{21}}) =$$
$$= a_{22} + sign(\delta)\frac{|\delta|^2 - (\delta^2 + a_{12}a_{21})}{|\delta| + \sqrt{\delta^2 + a_{12}a_{21}}} = a_{22} - sign(\delta)\frac{a_{12}a_{21}}{|\delta| + \sqrt{\delta^2 + a_{12}a_{21}}}.$$

Wilkinsonovo posunutí pro komplexní vlastní čísla:

$\lambda_{1,2} \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$

$\psi(\lambda) = \lambda^2 - tr(\tilde{A})\lambda + det(\tilde{A}),\ D = tr^2(\tilde{A}) - 4det(\tilde{A})$

$\lambda_{1,2} \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ pro $D < 0$, t.j. $tr^2(\tilde{A}) < 4det(\tilde{A})$

$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\left(tr(\tilde{A}) \pm i\sqrt{|D|}\right),\ \lambda_1 = \bar{\lambda}_2$

$\mathcal{R}(\lambda_{1,2}) = \frac{1}{2}tr(\tilde{A})$

$|\lambda_{1,2}|^2 = \frac{1}{4}\left(tr^2(\tilde{A}) + |D|\right) = \frac{1}{4}\left(tr^2(\tilde{A}) + 4det(\tilde{A}) - tr^2(\tilde{A})\right)$

$= det(\tilde{A})$.

Provedeme posunutí s λ_1 a pak s λ_2, tím se vyruší imaginární části vlastních čísel – tzv dvojité posunutí (double shift).

Můžeme vycházet od A_0:

$$\begin{aligned} A_0 - \lambda_1 I &= Q_0 R_0 \\ A_1 &= R_0 Q_0 + \lambda_1 I \\ A_1 - \lambda_2 I &= Q_1 R_1 \\ A_2 &= R_1 Q_1 + \lambda_2 I \end{aligned}$$

Z 2. a 3. rovnosti dostáváme

$$\begin{aligned} R_0 Q_0 + (\lambda_1 - \lambda_2) I &= Q_1 R_1 \qquad Q_0 [\cdots] R_0 \\ Q_0 R_0 Q_0 R_0 + (\lambda_1 - \lambda_2) Q_0 R_0 &= Q_0 Q_1 R_1 R_0 \\ Q_0 R_0 (Q_0 R_0 + (\lambda_1 - \lambda_2) I) &= Q_0 Q_1 R_1 R_0 \\ (A_0 - \lambda_1 I)(A_0 - \lambda_2 I) &= Q_0 Q_1 R_1 R_0 \end{aligned}$$

Položme

$M = (A_0 - \lambda_1 I)(A_0 - \lambda_2 I) = A_0^2 - 2\mathcal{R}(\lambda_{1,2}) A_0 + |\lambda_{1,2}|^2 I.$

Matice M je reálná, $M = A_0^2 - tr(\tilde{A}) A_0 + det(\tilde{A}) I$,
$M = Q_0 Q_1 R_1 R_0 = QR$ je její (reálný) QR rozklad.

Dále víme: $A_1 = Q_0^* A_0 Q_0$,
$A_2 = Q_1^* A_1 Q_1 = Q_1^* Q_0^* A_0 Q_0 Q_1 = Q^* A_0 Q$.

Shrnutí:

V matici A_k vybereme matici $\tilde{A}$ tvořenou posledními dvěma řádky a sloupci.
Pokud $tr^2(\tilde{A}) \geq 4det(\tilde{A})$ provedeme normální Wilkinsonovo posunutí, v opačném případě vytvoříme pomocnou matici $M = A_k^2 - tr(\tilde{A})A_k + det(\tilde{A})I$, najdeme její QR rozklad
$M = QR$ a
$A_{k+2} = Q^* A_k Q$.

Praktický QR algoritmus pro reálné matice

- Vycházíme z Hessenbergova tvaru.
- Používáme posunutí, nejlépe Wilkinsonovo.
- Používáme deflaci a oddělení s aplikací algoritmu na submatice, pokud dostaneme redukovanou matici.
- U matic 2×2 určíme vlastní čísla přímo. Pokud má tato matice reálné kořeny, algoritmus funguje i dál, pro komplexní kořeny by matice M pro dvojité posunutí měla vyjít nulová, ale může nastat cyklení z důvodů numerických chyb.
- Násobná vlastní čísla algoritmus určuje s velkými chybami.
- Neexistuje důkaz o konvergenci QR algoritmu (ani s posunutím) v obecném případě.
- Podobný algoritmus, který předcházel QR algoritmu, je založen na LU rozkladu.

QR algoritmus pro symetrické matice

- Matice v Hessenbergově tvaru je třídiagonální.
- Pokud má matice vícenásobné vlastní číslo, její Hessenbergův tvar musí být redukovaný.
- QR algoritmus zachovává třídaigonalitu a symetrii.
- Posunutí také zachovává třídaigonalitu a symetrii.
- Dvojité posunutí není potřebné.
- QR algoritmus konverguje k diagonální matici.

Poznámka

Pro symetrické matice se používá také Jacobiova metoda, která využívá Givensovy rotace a výběr vedoucích prvků (pivotů).

Numerický výpočet singulárního rozkladu reálné matice

- Buď A reálná matice, položme $C = A^T A$.
- Pomocí QR algoritmu najdeme diagonalizaci C: $V_1^T C V_1 = diag(\sigma_1^2, \ldots, \sigma_r^2, 0, \ldots, 0)$. (Během algoritmu musíme průběžně uchovávat součin použitých ortogonálních matic – matici V_1).
- Na matici AV_1 aplikujeme QR rozklad s výběrem vedoucích sloupců, přičemž prvky na diagonále R vezmeme nezáporné: $AV_1 P = UR$, tedy $U^T A V_1 P = R$.
- Přímým výpočtem se ověří, že $R^T R$ je diagonální, proto i matice R je diagonální.
- Pro $\Sigma = R$ a $V = V_1 P$ máme tedy

$$U^T A V = \Sigma,$$

navíc diagonální prvky Σ tvoří nerostoucí posloupnost.