

SPOSTRZEŻENIE 6: Wszystkie wartości własne symetrycznej macierzy dodatnio (ujemnie) określonej są dodatnimi (ujemnymi) liczbami rzeczywistymi.

Istotnie dla dowolnej pary własnej (λ, x) macierzy symetrycznej i dodatnio określonej mamy

$$0 < (x, Ax) = x^* A x = \lambda x^* x = \lambda \|x\|_2^2$$

a stąd $\lambda > 0$ ($\lambda \in \mathbb{R}$ na mocy symetrii A)

TWIERDZENIA O FAKTORYZACJACH UJAWNIAJĄCYCH WARTOŚCI WŁASNE

Twierdzenie Schura

Każda macierz kwadratowa A może być przedstawiona w postaci iloczynu

$$A = Q U Q^* \quad (Q^* \equiv \overline{Q^T})$$

- gdzie:
-) Q jest macierzą unitarną tj. $Q^{-1} = Q^*$ ($Q Q^* = Q^* Q = I$)
 -) U jest macierzą górną trójkątną tj. $u_{ij} = 0$ gdy $i > j$.

Dowód:

Zastosujemy metodę indukcji względem rozmiaru macierzy A .

Dla $n \equiv \dim A = 1$ twierdzenie jest trywialnie prawdziwe ($q_{11} = 1$, $u_{11} = a_{11}$). Niech zatem $n \geq 2$.

Załóżmy, że wymiar macierzy A jest równy n , a twierdzenie jest prawdziwe dla każdej macierzy kwadratowej rozmiaru $n-1$.

Niech (λ, x) będzie pewną parą własną macierzy A (tj. $Ax = \lambda x$)
 Możemy założyć, że $\|x\|_2^2 \equiv x^* x = 1$ (normalizacja x)

(19)

Rozważmy dowolną macierz unitarną H , której pierwszą kolumną to wektor x . Wówczas (H_1 to macierz o wymiarach $(n, m-1)$).

$$\begin{aligned}
 H^* A H &= \begin{bmatrix} x^* \\ \hline H_1^* \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} x & H_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^* \\ \hline H_1^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Ax & AH_1 \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} \boxed{x^* Ax}_{1 \times 1} & \boxed{x^* AH_1}_{1 \times (m-1)} \\ \hline \boxed{H_1^* Ax}_{(n-1) \times 1} & \boxed{H_1^* AH_1}_{(m-1) \times (m-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda x^* x & b^T \\ \hline \lambda H_1^* x & C \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Zauważmy, że $H_1^* x = 0$ - jest to wektor zawierający $m-1$ iloczynów skalarnych drugich i dalszych kolumn macierzy H_1 i wektora x , który jest do nich ortogonalny (na mocy konstrukcji macierzy H jest unitarna, zatem jej kolumny tworzą układ ortogonalnych wektorów jednostkowych). Ponieważ $x^* x = \|x\|_2^2 = 1$, zatem

$$H^* A H = \begin{bmatrix} \lambda & | & b^T \\ \hline 0 & | & C \end{bmatrix}$$

Na mocy założenia indukcyjnego macierz C (o wymiarach $m-1$) może być zapisana w postaci iloczynu

$$C = V T V^*$$

gdzie V jest macierzą unitarną, a T to macierz górna trójkątna.

Zdefiniujmy

$$Q = H \cdot \begin{bmatrix} 1 & | & 0 \\ \hline 0 & | & V \end{bmatrix}$$

↑ klatka 1×1 !

Zauważmy, że macierz Q jest unitarna.

(20)

Istotnie ...

$$Q Q^* = H \begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & V \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & V^* \end{bmatrix} H^* = H \begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & \underbrace{V V^*}_{= I_{(n-1) \times (n-1)}} \end{bmatrix} H^* = H I H^* = I$$

$\dim I = n$
↑

Podobnie dowodzimy, że $Q^* Q = I$.

Obliczmy teraz iloczyn

$$\begin{aligned} Q^* A Q &= \begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & V^* \end{bmatrix} \underbrace{H^* A H}_{\text{obliczona wcześniej...}} \begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & V \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & V^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & b^T \\ 0 & \underbrace{V^T V}_C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & V^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & b^T V \\ 0 & V^T \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \lambda & b^T V \\ 0 & \underbrace{V^* V^T}_{I_{(n-1) \times (n-1)}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda & b^T V \\ 0 & T \end{bmatrix} \equiv U \end{aligned}$$

Otrzymana macierz U jest evidentnie górna trójkątna, co na mocy indukcji dowodzi prawdziwości twierdzenia Schura ♣

WNIOSEK 1: Faktoryzacja Schura „ujawnia” wartości własne macierzy A — są nimi liczby na głównej diagonalnej macierzy U , czyli $u_{11}, u_{22}, \dots, u_{nn}$. Różne wartości własne pojawiają się tyle razy, ile wynosi ich krotność.

Istotnie, z faktu unitarności macierzy Q ($Q^* = Q^{-1}$) wynika, że macierze A i U są macierzami podobnymi.

Skądinąd wiadomo, że wartości własne macierzy podobnych

są takie same.

Ćwiczenie: Udowodnij ostatnie stwierdzenie. Wskazówka: korzystając z własności wyznacznika ($\det(AB) = \det A \cdot \det B$) wykaż, że wielomiany charakterystyczne macierzy podobnych są identyczne.

Rozwiązanie: Skoro $A \sim B$ to istnieje nieosobliwa macierz P taka, że:

$$B = PAP^{-1}$$

Wobec tego

$$\begin{aligned} p_B(\lambda) &\equiv \det(B - \lambda I) = \det(PAP^{-1} - \lambda I) = \\ &= \det[P(A - \lambda I)P^{-1}] = \det P \cdot \det(A - \lambda I) \underbrace{\det(P^{-1})}_{(\det P)^{-1}} = \\ &= \det(A - \lambda I) = p_A(\lambda) \end{aligned}$$

WNIOSEK 2: Jeśli macierz A posiada pełny układ wektorów własnych $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ tj. macierz $V = [v_1 | v_2 | \dots | v_n]$ jest nieosobliwa, to mamy:

$$Av_j = \lambda_j v_j \Rightarrow \underset{j=1, \dots, n}{AV} = V\Lambda \Rightarrow \Lambda = V^{-1}AV$$

$$\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$$

Otrzymane przekształcenie nie jest na ogół przekształceniem Schura bo V nie jest macierzą unitarną. Jeśli jednak macierz A jest symetryczna (de facto - wystarczy, że jest macierzą normalną) to wektory własne są - po normalizacji do długości jednostkowej - ortonormalne i $V^{-1} = V^*$ (i $Q = V$)

Morale: każda macierz symetryczna jest unitarnie podobna do macierzy diagonalnej!

Wynik ten ma wielkie znaczenie. Z powyższego wynika bowiem, że wyznaczenie występującej w faktoryzacji Schura macierzy Q jest - w przypadku

macierzy symetrycznej - równoważne wyrażeniu wszystkich wektorów własnych! W ogólnym przypadku (tj. gdy macierz A jest niesymetryczna) kolumny macierzy unitarnej Q nie mają związku z wektorami własnymi macierzy A .

Podsumowując mamy trzy faktoryzacje ujawniające wartości własne macierzy A :

$A = Q U Q^*$ - ogólnie prawdziwa dla każdej macierzy kwadratowej.
(Q - unitarna, U - górna trójkątna,
wartości własne A to elementy na głównej diagonalu macierzy U)

$A = V \Lambda V^{-1}$ - tylko dla macierzy posiadających regularne wartości własne (czyli pełny układ liniowo niezależnych wektorów własnych). Wartości własne A to linie na głównej diagonalu macierzy diagonalnej Λ . Kolumny V to wektory własne.

$A = Q \Lambda Q^*$ - tylko dla macierzy normalnych (w tym symetrycznych/hermitowskich). Wartości własne to linie na głównej diagonalu macierzy diagonalnej Λ . Kolumny macierzy unitarnej Q to (ortonormalne) wektory własne macierzy A .

ALGORYTM ITERACYJNY QR WYZNACZANIA WARTOŚCI WŁASNYCH MACIERZY

Podstawowe spostrzeżenie - nie istnieje ogólna metoda dokładna (skonstruowana) wyznaczania wartości własnych macierzy kwadratowej (dowolnego rozmiaru) - każdy algorytm numeryczny dla zagadnienia własnego jest „z przyrodzenia” iteracyjny!

Zacznijmy od omówienia iteracyjnego algorytmu QR poruszającego wyznaczanie wszystkich wartości własnych zadanej macierzy kwadratowej.

Potrzebne będą najpierw dwa algorytmy pomocnicze:

- rozkład (faktoryzacja) QR (interesujący i cenny sam w sobie)
- transformacja macierzy do postaci Hessenberga

Faktoryzacja QR

Niech A będzie dowolną macierzą (niecozystą) o wymiarach $m \times n$ (zakładamy że $m \geq n$) i niech jej rząd jest maksymalny (tzn. równy liczbie kolumn n). Wówczas, macierz A może być przedstawiona w postaci iloczynu

$$A = QR$$

gdzie Q jest macierzą prostokątną o wymiarach $m \times n$ i taką, że

$$Q^T Q = I_{m \times n}$$

(co oznacza, że wektory będące kolumnami macierzy Q są ortonormalne w \mathbb{R}^m)

a macierz R jest kwadratową macierzą górną trójkątną ($r_{ij} = 0$, gdy $i > j$) o wymiarze n .

Rozkład QR można przedstawić graficznie w następujący sposób

$$\begin{array}{c} \boxed{A} = \boxed{Q} \boxed{R} \\ m \times n \quad m \times m \quad m \times m \end{array}$$

Oznaczmy symbolem $q_i, i=1, \dots, n$ wektory ($\in \mathbb{R}^m$)-kolumny macierzy Q . Z założenia, mają miejsce warunki

$$(q_i, q_j) \equiv q_i^T q_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{gdy } i \neq j \\ 1 & \text{gdy } i = j \end{cases}$$

Faktory Q i R można obliczyć na dwa sposoby:

- stosując algorytm ortogonalizacji Grama-Schmidta (w wersji podstawowej lub - lepiej - zmodyfikowanej)
- stosując algorytm odbić Householdera.

Drugi z tych algorytmów bywa preferowany ze względu na lepsze własności numeryczne. Poniżej podajemy bez dowodu pseudokod algorytmu ortogonalizacji Grama-Schmidta w wersji zmodyfikowanej.

```

Q = A
for i = 1:n do
    rii = ||qi||2  (= √(qiT qi))
    qi = qi / rii
    for j = i+1:n do
        rij = qiT qj
        qj = qj - rij qi
    end {j}
end {i}
    
```


(25)

Pamiętajmy, że q_i i q_j oznaczają odpowiednie kolumny macierzy Q : $q_i = Q(1:m, i)$ i $q_j = Q(1:m, j)$.

- Ćwiczenie:
- napisać procedurę rozkładu QR w wybranym języku programowania (C, C++, Fortran, MatLab, Python...)
 - przetestować procedurę na wybranym przypadku skończonego „od tyłu” (załadamy Q i R i tworzymy A)

Zanim przejdziemy do zagadnienia istarnego, omówimy krótko typowe zastosowanie rozkładu QR. Rozważmy liniowy układ równań $Ax = b$. Jeżeli $m > n$ jest to układ nadokreślony, którego rozwiązanie rozumiemy jest w sensie najmniejszych kwadratów.

Zacznijmy od przypadku $m = n$, w którym macierz Q jest unitarna.

$$Ax = b \Rightarrow QRx = b \quad | \cdot Q^{-1} = Q^T$$

$$\Downarrow$$

$$Rx = Q^T b$$

Otrzymaliśmy prosty do rozwiązania układ z macierzą trójkątną. Jeżeli $m > n$ to do układu stosujemy macierz A^T :

$$Ax = b \Rightarrow A^T A x = A^T b$$

Ale, skoro $A = QR$ to $A^T = R^T Q^T$ i

$$A^T A = R^T \underbrace{Q^T Q}_{I_{n \times n}} R = R^T R$$

Układ przyjmuje postać

$$R^T R x = R^T Q^T b$$

czyli $R^T (Rx - Q^T b) = 0$.

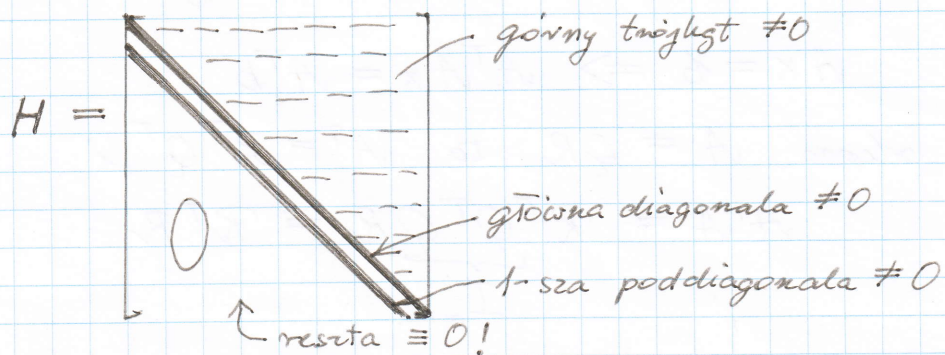
Jeżeli macierz A ma maksymalny rang to macierze R (i R^T) jest nieosobliwa, zatem ostatnia równość implikuje $Rx = Q^T b$

Jak wiada, metoda polegająca na wykonaniu faktoryzacji QR daje jednolity sposób rozwiązywania układów liniowych „zwykłych” i nadokreślonych.

Zauważmy, że koszt numeryczny rozkładu macierzy do postaci iloczynu QR jest proporcjonalny do mn^2 , czyli dla macierzy kwadratowej ($m=n$) – do n^3 . Faktorem, jako metoda rozwiązywania „zwykłego” układu z macierzą kwadratową jest to metoda numerycznie droższa niż faktoryzacja LU (ta ostatnia jest też $\sim n^3$, ale współczynnik przy n^3 jest mniejszy). Rozkład QR jest natomiast użyteczną metodą rozwiązywania układów nadokreślonych, a także – jak zobaczymy dalej – ma kluczowe znaczenie przy wyznaczaniu wartości własnych.

Sproszczenie macierzy do postaci Hessenberga

Macierz Hessenberga nazywamy macierz o następującej strukturze



Innymi słowy: $h_{ij} \equiv 0$ gdy $i > j+1$ ($i, j = 1, \dots, n$)

Okażuje się, że każdą macierz A można przekształcić przez podobieństwo (a więc zachowując wartości własne!) do postaci macierzy Hessenberga.

Oznacza to, że istnieje macierz unitarna Q taka, że macierz.

$$H = Q^* A Q$$

ma strukturę Hessenberga. Oto pseudokod tego przekształcenia oparty na wykorzystaniu metody odbić Householdera (macierz Q nie jest jawnie tworzona)

```

for k = 1:n-2 do
1)  $x = A(k+1:n, k)$ 
2)  $v = \text{sign}(x_1) \cdot \|x\|_2 e_1 + x$ 
3)  $v = v / \|v\|_2$ 
4)  $A(k+1:n, k:n) = A(k+1:n, k:n) - 2(vv^*)A(k+1:n, k:n)$ 
5)  $A(1:n, k+1:n) = A(1:n, k+1:n) - 2A(1:n, k+1:n)v v^*$ 
end {k}

```

Komentarz:

- w punkcie 2 tworzymy jest pomocniczy wektor (kolumnowy) v ; jest to wektor x , którego pierwszy element zmodyfikowano dodając do niego liczbę $\text{sign}(x_1) \|x\|_2$, gdzie $\text{sign}(x_1) = 1$ w przypadku $x_1 \geq 0$ lub $\text{sign}(x_1) = -1$ gdy $x_1 < 0$.
- w punkcie 3 dokonujemy normalizacji wektora v
- w punktach 4 i 5 pojawia się obiekt vv^* - jest to macierz kwadratowa (o wymiarze $n-k$) otrzymywana w wyniku następującej operacji:

$$vv^* = \begin{bmatrix} v \\ v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v^* \\ 1 \times (n-k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} vv^* \\ \end{bmatrix} \begin{matrix} (n-k) \times 1 \\ (n-k) \times (n-k) \end{matrix}$$

$(vv^*)_{ij} = v_i \bar{v}_j \rightarrow$ sprzężenie zespolone!

- koszt numeryczny transformacji jest $\sim \frac{10}{3} n^3$ operacji zmiennoprzecinkowych

Transformacja macierzy do postaci Hessenberga ma kluczowe znaczenie w iteracyjnym algorytmie wyznaczania wartości własnych.

Iteracyjny algorytm wyznaczania wartości własnych (proces QR)

Niech A oznacza dowolną macierz kwadratową o wymiarze n .

Procesem QR nazywamy następujący algorytm:

$$A^{(0)} = A$$

for $k = 1, 2, 3 \dots$ do

(1) oblicz rozkład QR macierzy $A^{(k-1)}$ czyli
faktory $Q^{(k)}$ i $R^{(k)}$ takie, że $A^{(k-1)} = Q^{(k)} R^{(k)}$

2) oblicz macierz $A^{(k)}$ mnożąc faktory $Q^{(k)}$ i $R^{(k)}$
w odwrotnej kolejności tj. $A^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)}$

Załóżmy, że macierz A jest symetryczna. Dowodzi się, że w procesie QR macierze $A^{(k)}$ zbiegają do macierzy diagonalnej D .

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = D$$

oraz elementy na diagonalu tej macierzy (d_{ii} , $i = 1, 2, \dots, n$) zbiegają do wartości własnych macierzy A . Pamiętajmy, że w przypadku macierzy symetrycznej, wszystkie wartości własne są regularne (niezdegenerowane). W procesie QR, wartości własne o wartości większej niż 1 pojawiają się na diagonalu macierzy gramowej D w tylu egzemplarzach ile wynosi ich

krotność (algebraiczna = geometryczna). Co więcej, macierze unitarne $Q^{(k)}$ zbiegają w tym procesie do macierzy jednostkowej I

$$\lim_{k \rightarrow \infty} Q^{(k)} = I$$

a macierz $S^{(k)} = Q^{(1)} Q^{(2)} \dots Q^{(k-1)} Q^{(k)}$ zbiega do macierzy unitarnej (ortogonalnej), której kolumny są wektorami własnymi macierzy A . W ten sposób w granicy otrzymujemy de facto narzędzie, o którym mówi twierdzenie Schura zastosowane do przypadku macierzy symetrycznej.

Co z przypadkiem ogólnym, czyli gdy macierz A jest niesymetryczna? W takim przypadku macierze $A^{(k)}$ zbiegają do macierzy górnej trójkątnej lub blokowej górnej trójkątnej (na głównej diagonalu pojawiają się bloki 2×2 odpowiadające zespolonym wartościom własnym). Elementy na głównej diagonalu stanowią aproksymację wartości własnych. Tym razem nie ma prostego związku między kolumnami macierzy $S^{(k)}$ ($k \rightarrow \infty$) a wektorami własnymi (w przeciwieństwie do przypadku symetrycznego, wektory własne macierzy niesymetrycznej są z reguły nieortogonalne!). Wektory te można wyznaczyć a posteriori przy użyciu innych metod (np. metody odwrotnych iteracji, omówionej dalej).

Podstawowy algorytm iteracyjny QR wymaga dalszych ulepszeń, aby jego stosowanie było praktyczne i numerycznie efektywne.

Zauważmy, że narzędzie QR macierzy $A^{(k-1)}$ wymaga w przypadku ogólnym $\sim n^3$ operacji zmiennoprecyzyjnych.

Stosując przekształcenie do postaci Hessenberga dla wyjątkowej

macierze $A \equiv A^{(0)}$ obniżamy koszt numeryczny każdej iteracji procesu QR do $\sim n^2$. Wynika to z „wiodowej” cechy macierzy typu Hessenberga: iloczyn RQ faktoriów Q i R takiej macierzy jest również macierzą Hessenberga (dlatego wystarczy przekształcić macierz $A^{(0)}$, następnie $A^{(k)}$ są automatycznie też Hessenberg-owe!)

Zysk z przekształcenia Hessenberga jest szczególnie widoczny, gdy mamy do czynienia z macierzą symetryczną. Jak łatwo zauważyć, po przeprowadzeniu do postaci Hessenberga macierz symetryczna staje się dodatkowo macierzą trójdiagonalną! Rozkład QR takiej macierzy jest jeszcze tańszy i wynosi $\sim n$! Co więcej, możliwe jest także zorganizowanie procesu QR, że po $O(n)$ iteracjach uzyskujemy zbliżenie procesu QR w granicach dokładności maszynowej. Zatem, z praktycznego punktu widzenia, iteracyjny proces QR wyznaczenia widma macierzy symetrycznej ma koszt $O(n^3)$.

Praktyczna implementacja algorytmu QR obejmuje zwykle dwa dodatkowe zabiegi: przesunięcie widma (shift) oraz deflację (rozszepienie wielkiego zadania na mniejsze, niezależne zadania). Algorytm QR z przesunięciem widma ma postać:

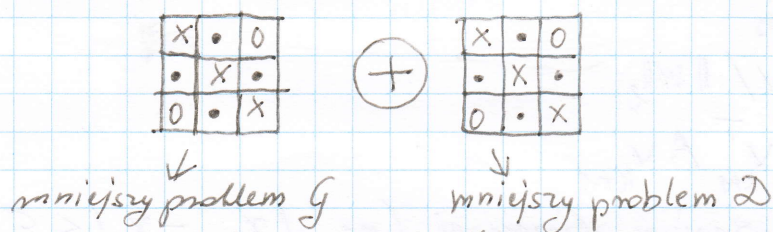
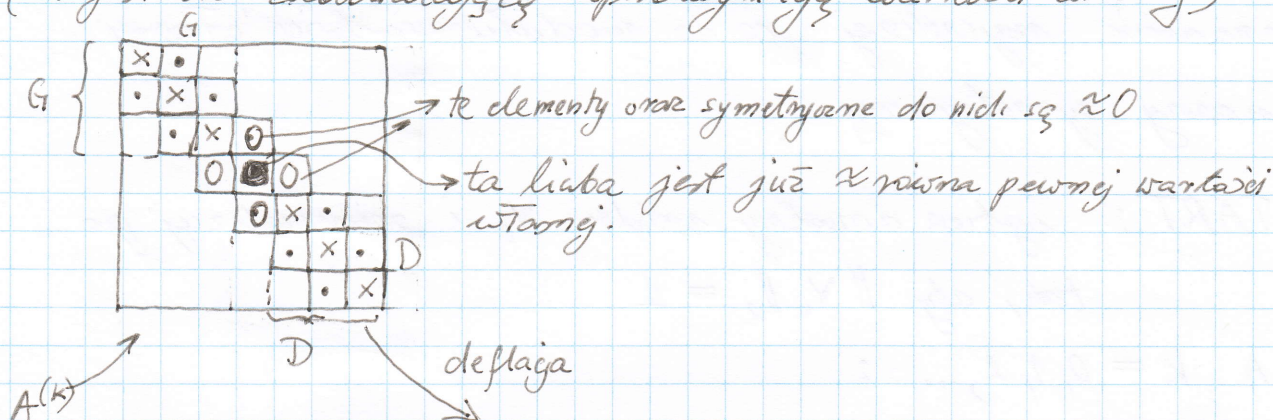
$$A^{(0)} = A$$

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

- (1) oblicz rozkład QR macierzy $A^{(k-1)} - \mu_k I$
czyli faktory $Q^{(k)}$ i $R^{(k)}$ takie, że: $A^{(k-1)} - \mu_k I = Q^{(k)} R^{(k)}$
- (2) oblicz macierz $A^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)} + \mu_k I$

Parametry przesunięcia μ_k dobierane są tak, aby przyspieszyć zbieżność

poszczególne elementy diagonalnych macierzy $A^{(k)}$ do wartości własnych macierzy A . W przypadku symetrycznym. okazuje się właściwością dla jednej z wartości własnych oznacza, że w jednym z wierszy macierzy $A^{(k)}$ jedynym elementem istotnie różnym od zera jest element na głównej diagonalnej (i jest on zadowalającą aproksymacją wartości własnej)



stosujemy do nich QR niezależnie i kontynuujemy proces...

Ponieważ macierz $A^{(k)}$ jest symetryczna, możliwe jest wówczas rozdzielenie zagadnienia na 2 mniejsze (vide powyższy schemat) i kontynuacja procesu QR niezależnie dla tych problemów.

Szczegółowe strategię wyboru przesunięć μ_k opisuje specjalistyczna literatura. Wyrafinowane warianty implementacji procesu QR dla przypadku macierzy symetrycznych i niesymetrycznych zawiera open-source biblioteka LAPACK. Algorytm QR „zaszyty” jest w MATLAB-owej procedurze eig.

METODY POTĘGOWE: PROSTA i ODWROTNA

w przypadku, gdy zamiast pełnego widma macierzy poszukujemy pojedynczej (lub kilku) par własnych, można zastosować metody potęgowe. Zacznijmy od omówienia algorytmu metody potęgowej (prostej) w варианте umożliwiającym wyznaczenie najbliższej co do modułu wartości własnej macierzy symetrycznej.

START: wybierz dowolny wektor v_0 i znormalizuj go tak, aby $\|v_0\|_2 = 1$

DLA $k = 0, 1, 2, \dots$:

- (1) $w = A v_k$
- (2) $v_{k+1} = w / \|w\|_2$
- (3) $\gamma_{k+1} = v_{k+1}^T A v_{k+1}$
- (4) sprawdź kryterium zbieżności (np. $|\gamma_{k+1} - \gamma_k| \leq \varepsilon$)

Niech wartości własne macierzy symetrycznej A są ponumerowane w taki sposób, że

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

i niech v_0 nie będzie ortogonalny do wektora własnego x_1 odpowiadającego wartości własnej λ_1 . Wówczas mamy miejsce oszacowania

$$|\gamma_k - \lambda_1| \approx O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^{2k}\right)$$

$$\|v_k - (\pm x_1)\|_2 \approx O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)$$

Oznacza to, że para (γ_k, v_k) dąży do pary własnej (λ_1, x_1) lub $(\lambda_1, -x_1)$, a tempo zbieżności zależy od stosunku $|\lambda_2|/|\lambda_1|$.

Jeśli zatem $|\lambda_1| \approx |\lambda_2|$, tempo zbieżności metody potęgowej jest bardzo wolne. Z drugiej strony, jedyną „pracochłonną” operacją w algorytmie jest mnożenie macierz - wektor.

Gdy macierz A jest rzadka, wówczas koszt numeryczny tej operacji (pod warunkiem odpowiedniej implementacji) jest relatywnie niski.

Metoda odwrotnych iteracji

Metoda odwrotnych iteracji jest skuteczną techniką wyznaczania pojedynczej (prostej) wartości własnej i odpowiadającego jej wektora własnego w sytuacji, gdy znana jest przybliżenie tej wartości własnej.

Załóżmy, że liczba (na ogół zespolona) μ nie jest wartością własną macierzy A . Jeżeli $\{\lambda_i, q_i\}$ jest parą własną macierzy A to wektor q_i jest również wektorem własnym macierzy $(A - \mu I)^{-1}$, a odpowiadająca mu wartość własna tej macierzy to liczba $(\lambda_i - \mu)^{-1}$.
Zatem:

$$Aq_i = \lambda_i q_i \Rightarrow (A - \mu I)q_i = (\lambda_i - \mu)q_i$$

$$\Downarrow$$

$$(A - \mu I)^{-1} q_i = \frac{1}{\lambda_i - \mu} q_i$$

Niech teraz liczba μ będzie dostatecznie blisko aproksymacją pewnej wartości własnej λ_j macierzy A . Wówczas, liczba $(\lambda_j - \mu)^{-1}$ będzie o wiele większa (co do modułu) niż liczby $(\lambda_j - \mu)^{-1}$

dla pozostałych wartości własnych λ_j , $j \neq j$. Wynika z tego, że zmyślona metoda potęgowa zastosowana do macierzy $(A - \mu I)^{-1}$ będzie szybko zbieżna (do $\tilde{\lambda}_j = (\lambda_j - \mu)^{-1}$)

(34)

Spostrezenie to stanowi podstawę tzw. odwrotnej metody potęgowej lub metody odwrotnych iteracji (MOI)

Oto zapis MOI w formie wygodnej do implementacji:

START: wybieramy dowolny wektor v_0 i normalizujemy go tak, aby $\|v_0\|_2 = 1$; kładziemy $p_0 = 0$.

DLA $k = 1, 2, 3, \dots$:

- (1) rozwiązujemy układ liniowy $(A - \mu I)w = v_{k-1}$
- (2) obliczamy liczbę $p_k = (w^H v_{k-1})^{-1}$ ($w^H = (\overline{w^T})$)
- (3) obliczamy wektor $v_k = w / \|w\|_2$
- (4) jeżeli $|p_k - p_{k-1}| > \epsilon$ to wracamy do (1)
w przeciwnym razie obliczamy wartość własną
 $\lambda = \mu + p_k$

Odpowiadającym jej (znormalizowanym) wektorem własnym jest v_k .

Metodę odwrotnych iteracji możemy wykorzystać do poprawienia dokładności wybranej wartości własnej obliczonej inną metodą (np. w procesie QR). Jest to również skuteczna metoda „śledzenia” zmienności wybranej wartości własnej względem parametru w zadaniach, gdzie macier A jest funkcją pewnego parametru η - takie zadania są typowe dla analizy stateczności (np. przepływów, gdzie η może być częstotliwością płynu).

Tempo zbieżności MOI zależy od wartości stosunku

$|\mu - \lambda_j| / |\mu - \lambda_k|$, gdzie λ_j i λ_k to pierwsza i druga najbliższa μ (w sensie modułu) wartość własna macierzy A .

Dokładniej - ma miejsce następujące twierdzenie:

TW: Niech λ_j i λ_K oznaczają, odpowiednio, najbliższą i drugą najbliższą liczbę μ wartości własnej tj.:

$$|\mu - \lambda_j| < |\mu - \lambda_K| < |\mu - \lambda_i| \text{ dla } i \neq j, K$$

Niech wektor startowy v_0 nie jest ortogonalny do wektora własnego q_j . Wówczas

$$\|v^n - (\pm q_j)\|_2 = O\left(\left|\frac{\mu - \lambda_j}{\mu - \lambda_K}\right|^n\right)$$

$$|\lambda^n - \lambda_j| = O\left(\left|\frac{\mu - \lambda_j}{\mu - \lambda_K}\right|^{2n}\right)$$

gdzie n oznacza numer iteracji MOI.