

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

3. előadás

A sajátérték-probléma numerikus
megoldása

Sajátérték, sajátvektor

Definíció. Legyen A n -ed rendű mátrix. A $\lambda \in \mathbb{C}$ számot az A sajátértékének hívjuk, ha létezik olyan $v \in \mathbb{C}^n, v \neq 0$ vektor, amellyel

$$Av = \lambda v.$$

Ekkor v -t a λ -hoz tartozó sajátvektornak mondjuk.

Sajátértékek

- Egy A mátrix sajátértékei pontosan a

$$p_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$$

karakterisztikus polinomjának a gyökei.

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} - \lambda & a_{n-1,n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix}$$

Sajátértékek

- Trianguláris mátrix sajátértékei a mátrix főátlójában álló elemei.
- A karakterisztikus polinomot szokás az alábbi alakban is felírni:

$$p_A(\lambda) = (-1)^n (\lambda^n - \alpha_1 \lambda^{n-1} - \dots - \alpha_{n-1} \lambda - \alpha_n)$$

- Egy $p_A(\lambda)$ polinomhoz több olyan mátrix is megadható, amelynek az adott polinom a karakterisztikus polinomja. Ezek közül különösen fontos a polinom *kísérő mátrixa*.

Karakterisztikus polinom kísérő mátrixa

Az alábbi

$$p_A(\lambda) = (-1)^n (\lambda^n - \alpha_1 \lambda^{n-1} - \dots - \alpha_{n-1} \lambda - \alpha_n)$$

polinomhoz tartozó *kísérő mátrix*

$$C_p = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \cdots & \alpha_n \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Összefüggés a mátrix sajátértékei, determinánsa és nyoma között

$$\text{a) } \alpha_1 = \sum_{j=1}^n a_{jj} = \text{tr } A = \sum_{j=1}^n \lambda_j$$

$$\text{b) } (-1)^{n+1} \alpha_n = \det A = \prod_{j=1}^n \lambda_j$$

Bizonyítás

- a) Írjuk fel λ^{n-1} együtthatóját, felhasználva a karakterisztikus polinom előbbi két, valamint a gyöktényezős alakját!

$$(-1)^n(-\alpha_1) = (-1)^{n-1} \sum_{j=1}^n a_{jj} = (-1)^n(-1) \sum_{j=1}^n \lambda_j$$

Szorozzuk meg az előbbi egyenlőséget

$(-1)^{n+1}$ -nel!

$$\alpha_1 = \sum_{j=1}^n a_{jj} = \sum_{j=1}^n \lambda_j$$

Bizonyítás

b) Tekintsük a karakterisztikus polinomnak a $\lambda = 0$ helyen vett helyettesítési értékét!

$$(-1)^n (-\alpha_n) = \det(A - 0I) = (-1)^n \prod_{j=1}^n (-\lambda_j)$$

Ebből következőleg

$$(-1)^{n+1} \alpha_n = \det A = \prod_{j=1}^n \lambda_j.$$

Innen rögtön látható az is, hogy egy mátrix akkor és csak akkor reguláris, ha nincs 0 sajátértéke.

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{Sajátértékek: } \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 4.$$

Karakterisztikus polinom: $p_A(\lambda) = \lambda^2 - 5\lambda + 4$

$$\text{tr}(A) = 2 + 3 = 5 = \lambda_1 + \lambda_2 = 1 + 4$$

$$\det(A) = 4 = \lambda_1 \lambda_2 = 1 \cdot 4$$

A karakterisztikus polinom kísérő mátrixa: $\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Hasonlósági transzformáció

Definíció. Legyen A tetszőleges mátrix, T pedig tetszőleges reguláris mátrix. Az

$$A \mapsto T^{-1}AT$$

hozzárendelést hasonlósági transzformáció-nak nevezzük. Azt mondjuk, hogy A hasonló B -hez, ha létezik olyan reguláris T mátrix, hogy $B = T^{-1}AT$. Jele: $A \sim B$.

Hasonlóság

Állítás. Hasonló mátrixok karakterisztikus polinomjaik megegyeznek és így sajátértékeik is azonosak.

Bizonyítás.

Legyen $B = T^{-1}AT$.

$$\begin{aligned} p_A(\lambda) &= \det(A - \lambda I) = \det(T(T^{-1}AT - \lambda I)T^{-1}) \\ &= \det T \det(T^{-1}AT - \lambda I) \det T^{-1} \\ &= \det T \det T^{-1} \det(B - \lambda I) \\ &= p_B(\lambda) \end{aligned}$$

Az állítás megfordítása

- Az állítás megfordítása nem igaz. Az alábbi A mátrix sajátértékei megegyeznek az egységmátrix sajátértékeivel, a két mátrix mégsem hasonlóak.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \neq T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} T$$

Hasonlóság

Állítás. Ha $A \sim B$ és A egy sajátvektorrendszere $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$, akkor B sajátvektorrendszere felírható $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ formában, ahol

$$v_j = T^{-1}u_j \quad (1 \leq j \leq n).$$

Bizonyítás.

Legyen u_j az A tetszőleges sajátvektora.

Ekkor

$$B(T^{-1}u_j) = T^{-1}AT(T^{-1}u_j)$$

Bizonyítás (folyt.)

$$\begin{aligned} B(T^{-1}u_j) &= T^{-1}AT(T^{-1}u_j) = T^{-1}Au_j \\ &= T^{-1}\lambda_j u_j = \lambda_j T^{-1}u_j \end{aligned}$$

A fenti egyenlőség azt mutatja, hogy B sajátvektorai, pontosan az állításban megfogalmazott módon írhatók fel.

A sajátérték-probléma numerikus megoldása

Feladattípusok

- Határozzuk meg egy mátrix összes sajátértékét.
- Határozzuk meg egy mátrix összes sajátértékét és minden sajátértékéhez egy-egy sajátvektort.
- Határozzuk meg egy mátrix minimális/maximális abszolút értékű sajátértékét és hozzá egy hozzá tartozó sajátvektort.

A numerikus módszerek fontossága

Mivel egy mátrix sajátértékeinek a meghatározásának problémája ekvivalens egy algebrai egyenlet gyökeinek megadásával, így a Ruffini-Abel tétel miatt, nincs olyan **véges**, effektív eljárás, amellyel a sajátértékeket **tetszőleges** mátrix esetén **pontosan** meg tudnánk határozni.

Sajátvektorok

- A továbbiakban a hangsúlyt a *sajátértékek* kiszámítására helyezzük. Adott sajátértékhez tartozó sajátvektor, megkapható egy homogén lineáris egyenletrendszer megoldásával. (Ha a sajátvektornak ismert egy közelítése, akkor a hatékonyabb inverz hatványiteráció is alkalmazható.)

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{Sajátértékek: } \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 4.$$

A λ_1 -hez tartozó sajátvektor lehet minden olyan $\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$ vektor, amelyre $v_1 + v_2 = 0$, ahol $v_1 \neq 0$.

A λ_2 -höz tartozó sajátvektor lehet minden olyan $\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$ vektor, amelyre $v_2 = 2v_1$, ahol $v_1 \neq 0$.

Sajátértékek közelítése QR-transzformációval

QR-transzformáció

Tetszőleges A mátrix esetén képezhető az alábbi mátrixsorozat:

$$A_k = Q_k R_k$$

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

Q_k ortogonális mátrix

R_k felső trianguláris mátrix.

Tétel

A $V_k = Q_1 Q_2 \dots Q_k$ ortogonális és az $U_k = R_k R_{k-1} \dots R_1$ felső trianguláris mátrixokat bevezetve

$$\begin{aligned} a) \quad A_k &= (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1})^T A_1 (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1}) \\ &= V_{k-1}^T A_1 V_{k-1} \end{aligned}$$

$$b) \quad A_1^k = V_k U_k.$$

Bizonyítás

A bizonyítást k szerinti indukcióval végezzük.
 $k=1$ -re az állítás igaz.

a) Mivel a Q_k ortogonális mátrix reguláris és

$$A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k$$

így

$$\begin{aligned} A_{k+1} &= Q_k^T A_k Q_k \\ &= Q_k^T (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1})^T A_1 (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1}) Q_k \end{aligned}$$

az indukciós feltevés alapján :

$$\begin{aligned} &= (Q_1 Q_2 \dots Q_k)^T A_1 (Q_1 Q_2 \dots Q_k) \\ &= V_k^T A_1 V_k. \end{aligned}$$

Bizonyítás

$$\begin{aligned} \text{b)} \quad A_1^{k+1} &= A_1 A_1^k \\ &= A_1 V_k U_k \\ &= A_1 (Q_1 Q_2 \dots Q_k) (R_k R_{k-1} \dots R_1) \\ &= (Q_1 Q_2 \dots Q_k) A_{k+1} (R_k R_{k-1} \dots R_1) \\ &= (Q_1 Q_2 \dots Q_k) Q_{k+1} R_{k+1} (R_k R_{k-1} \dots R_1) \\ &= V_{k+1} U_{k+1} \end{aligned}$$

felhasználva a $V_k A_{k+1} = A_1 V_k$ összefüggést.

Parlett klasszikus konvergencia-tétele a QR-algoritmusra

- Ha az $A_1 \in R^{n \times n}$ mátrixra teljesül, hogy sajátértékeit alkalmasan indexezve $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots |\lambda_n| > 0$ és megadható az A_1 -et diagonalizáló olyan X mátrix, amellyel

$$X^{-1} A_1 X = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$
és létezik az $X^{-1} = LR$ felbontás, akkor

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A_k = \lim_{k \rightarrow \infty} R_k = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * & * & \dots & * \\ 0 & \lambda_2 & * & \dots & * \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & * \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} Q_k = I.$$

A QR-algoritmus előnyei

- Mindig alkalmazható, mert minden mátrixnak van QR-felbontása.

- Megőrzi a szimmetriát.

Ha A_k szimmetrikus, akkor

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k$$
$$(A_{k+1})^T = (Q_k^T A_k Q_k)^T = A_{k+1}$$

- A kerekítési hibákkal szemben stabilisan viselkedik.

Eltolásos QR-algoritmus

- A QR-algoritmus konvergenciája döntően a sajátértékek elhelyezkedésétől, a $|\lambda_i| / |\lambda_j|$ hányadosok nagyságától függ.
- A konvergencia jelentősen javítható az eltolásos QR-algoritmus segítségével. Minden lépés előtt meghatározunk egy alkalmas $\sigma_k \in R$ konstanst, és a következő képletpárokkal dolgozunk:

Eltolásos QR-algoritmus

Az eltolt mátrix ortogonális trianguláris felbontása:

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

Fordított sorrendben összeszorzás és korrekció:

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

```

0 # Az eltolásos Q.R transzformációt megvalósító Maple eljárás
1 # Az A=Q.R felbontást a beépített QRDecomposition eljárás adja
2
3 ELTOLT_QR_TRAFO := proc(A::'Matrix'(numeric), kMAX::posint, epsilon::positive)
4 local A1, Q1, R1, MaxElem, i, k, j, n, feps, sigmak;
5 #option trace;
6 use LinearAlgebra in
7 A1 := evalf(A);      # lemásoljuk az A mátrixot
8 feps := evalf(epsilon);
9 n := RowDimension(A);
10 for k from 1 while k<kMAX do
11     MaxElem := 0;
12     for i from 2 to n do
13         for j from 1 to i-1 do
14             if (abs(A1[i,j]) > MaxElem) then
15                 MaxElem := abs(A1[i,j]);
16             end if;
17         end do;
18     end do;
19     #print(k, MaxElem);
20     if MaxElem > feps then
21         sigmak := A1[n,n];
22         Q1,R1 := QRDecomposition(A1-sigmak*IdentityMatrix(n),fullspan);
23         A1 := R1.Q1 + sigmak*IdentityMatrix(n);
24     else return A1;
25     end if;
26 end do;
27 return A1;
28 end use;
29 end proc:

```

Sajátértékek perturbációja

Sajátértékek perturbációja

Feladat: Jelölje az A mátrix sajátértékeit

$$\lambda_1, \dots, \lambda_n$$

a ΔA mátrixszal „perturbált” $A + \Delta A$ mátrix sajátértékeit $\tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_n$.

Adjunk felső korlátot a

$$|\lambda_i - \tilde{\lambda}_i|$$

eltérésekre.

Sajátértékek perturbációja (Ostrowski-tétel)

- Legyenek az $A \in R^{n \times n}$ mátrix sajátértékei $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Ekkor bármely $\varepsilon > 0$ -hoz megadható olyan $\delta > 0$, hogy ha a $\Delta A \in \tilde{R}^{n \times n}$ perturbáló mátrix normájára $\|\Delta A\| < \delta$, akkor a $\tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_n$ sajátértékeihez megadható az $1, 2, \dots, n$ egészek olyan $j_1, \dots, j_n$ permutációja, amellyel teljesül a

$$\max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \tilde{\lambda}_{j_i}| \leq \varepsilon$$

egyenlőtlenség.

Sajátértékek perturbációja

Egy explicit felső korlát a változásra:

$$\left| \lambda_i - \tilde{\lambda}_{j_i} \right| \leq n \left(\|A\|_2 + \|A + \Delta A\|_2 \right)^{1-\frac{1}{n}} \|\Delta A\|_2^{\frac{1}{n}}$$

Abszolút norma.

A továbbiakban feltesszük, hogy tetszőleges D diagonális mátrixra:

$$\|D\| = \max_{1 \leq j \leq n} |d_{jj}|.$$

Sajátértékek perturbációja (Bauer-Fike tétel)

- Ha az $A \in R^{n \times n}$ mátrix diagonalizálható, vagyis $T^{-1}AT = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \in C^{n \times n}$ a $T \in C^{n \times n}$ reguláris mátrixszal, akkor tetszőleges $\Delta A \in R^{n \times n}$ perturbáció esetén az $A + \Delta A$ perturbált mátrix minden $\tilde{\lambda}_j$ sajátértékére igaz a

$$\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \tilde{\lambda}_j| \leq \text{cond}(T) \|\Delta A\|.$$

egyenlőtlenség.

Sajátértékek perturbációja

- Ha az $A \in R^{n \times n}$ mátrix szimmetrikus, akkor tetszőleges $\Delta A \in R^{n \times n}$ perturbáció esetén az $A + \Delta A$ perturbált mátrix $\tilde{\lambda}_j$ sajátértékeire

$$\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \tilde{\lambda}_j| \leq \|\Delta A\|_2.$$

Szimmetrikus mátrixok sajátértékei mindig jól kondicionáltak.

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy ha két mátrix sajátértékei megegyeznek és mindkét mátrix diagonalizálható, akkor hasonlóak.

Gyakorló feladatok

- Közelítse az alábbi mátrix sajátértékeit a QR-algoritmussal.

$$\begin{pmatrix} 0 & 3 & -5 \\ 4 & -2 & 2 \\ -4 & 3 & -1 \end{pmatrix}$$

Gyakorló feladatok

- Határozza meg az alábbi $B(\varepsilon) \in R^{2 \times 2}$ és $\varepsilon = 0$ esetben adódó $B(0)$ mátrix sajátértékeit és sajátvektorait. Mit tapasztal?

$$B(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.