1. Svojstveni problem

1.1. Kanonske forme

Definicija 1.1. *Neka je A* ***kvadratna matrica*** *reda n. Polinom*

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

zove se ***karakteristični polinom*** *matrice A. Nultočke (korijeni karakterističnog polinoma su* ***svojstvene vrijednosti*** *matrice A.*

Prvo, uočimo da svaka matrica A ima točno n svojstvenih vrijednosti (osnovni teorem algebre). Nadalje, iako je matrica realna, ona može imati kompleksne svojstvene vrijednosti i takve uvijek dolaze u konjugirano-kompleksnim parovima.

Na primjer, matrica

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

je realna, ali su njezine svojstvene vrijednosti $\pm i$.

Iako se ovakav način definicije svojstvenih vrijednosti čini pomalo čudnim, to je jedini način da se u definiciji izbjegnu svojstveni vektori. Naime, standardna definicija za svojstveni par (λ, x), pri čemu je $x \neq 0$, kaže da je λ svojstvena vrijednost, a x svojstveni vektor matrice A ako vrijedi

$$Ax = \lambda x.$$

Odatle se jednostavnim prebacivanjem na lijevu stranu dobiva

$$(A - \lambda I)x = 0,$$

pa će taj linearni sustav imati netrivijalno rješenje x ako i samo ako je matrica sustava singularna, što možemo provjeriti računanjem determinante.

Ovdje prikazan način definicije svojstvenih vrijednosti omogućava definiciju i lijevih i desnih **svojstvenih vektora**.

Definicija 1.2. *Vektor $x \neq 0$ koji zadovoljava $Ax = \lambda x$ je* ***desni*** *svojstveni vektor matrice A za svojstvenu vrijednost λ, a vektor $y \neq 0$ koji zadovoljava $y^* A = \lambda y^*$ je* ***lijevi*** *svojstveni vektor matrice A za svojstvenu vrijednost λ.*

Jasno je da su u nekim slučajevima desni i lijevi svojstveni vektori jednaki. Na primjer, ako je matrica simetrična ili hermitska.

Iz uvodnih definicija nije jasno kako treba računati svojstvene vrijednosti, ni svojstvene vektore. Naizgled jednostavno rješenje je rješavanje nelinearne jednadžbe $p(\lambda) = 0$. Međutim to se **nikad** tako ne radi, jer umjesto realnih svojstvenih vrijednosti može dati kompleksne. Pokušajte, za vježbu, numerički naći sve nultočke vrlo pitomo izgleadajućeg polinoma

$$p(x) = (x - 1) \cdot (x - 2) \cdots (x - 19) \cdot (x - 20),$$

ali tako da je polinom napisan po potencijama od x.

Postavlja se pitanje u koju formu treba dovesti matricu A da joj lako pročitamo svojstvene vrijednosti.

Naravno, najjednostavnija forma je **dijagonalna** forma, ali ne mogu se sve matrice dijagonalizirati. Na primjer, matrica

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

sigurno se ne može dijagonalizirati, jer bi njezina dijagonalna forma trebala biti

$$\Lambda = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Međutim i kod ove matrice lako se čitaju svojstvene vrijednosti. Naime, determinanta trokutastih matrica je produkt njezinih dijagonalnih elemenata, pa su svojstvene vrijednosti ove matrice baš elementi koji pišu na njezinoj dijagonali.

Dakle, ostaje pronaći transformacije, koje će općenitu matricu dovesti u trokutastu formu, ali tako da ne mijenjaju svojstvene vrijednosti.

Međutim, čak iako napravimo transformacije koje realnu matricu dovode u trokutastu formu, time nećemo biti jako zadovoljni, jer ako matrica ima kompleksnih svojstvenih vrijednosti, onda ćemo morati koristiti kompleksnu aritmetiku (koja je podržana u nekim programskim jezicima), ali je beskrajno spora.

Umjesto trokutaste forme, matricu se može dovesti i na blok-gornjetrokutastu formu i to onu koja ima 1×1 blokove na dijagonali ako je kompleksna vrijednost realna, a 2×2 blok na dijagonali za par konjugirano-kompleksnih svojstvenih vrijednosti. Ako smo doveli matricu u takvu blok-gornjetrokutastu formu, tj. ako su joj na dijagonali 1×1 ili 2×2 blok-matrice

$$T = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1b} \\ & A_{22} & \cdots & A_{2b} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & A_{bb} \end{bmatrix},$$

onda je lako izračunati

$$\det(T - \lambda I) = \prod_{k=1}^{b} \det(A_{kk} - \lambda I).$$

Drugim riječima, time smo izbjegli korištenje kompleksne aritmetike.

Osnovne transformacije kojima se matrice dovode na takve kanonske forme su **sličnosti**.

Definicija 1.3. *Neka je S proizvoljna nesingularna matrica, a A i B su takve da vrijedi*

$$B = S^{-1}AS.$$

*Matrice A i B zovemo **sličnim matricama**, a S **sličnošću**.*

Propozicija 1.4. *Ako je $B = S^{-1}AS$, matrice A i B imaju jednake svojstvene vrijednosti. Nadalje, x (y) je desni (lijevi) svojstveni vektor matrice A, ako i samo ako je $S^{-1}x$ (S^*y) desni (lijevi) svojstveni vektor matrice B.*

Dokaz. Za kvadratne matrice vrijedi Binet–Cauchyjev teorem

$$\det(X \cdot Y) = \det X \cdot \det Y,$$

pa imamo

$$\begin{aligned}\det(B - \lambda I) &= \det(S^{-1}AS - \lambda S^{-1}S) = \det(S^{-1}(A - \lambda I)S) \\ &= \det(S^{-1}) \det(A - \lambda I) \det S = \det(A - \lambda I).\end{aligned}$$

Time smo pokazali da A i B imaju isti karakteristični polinom. Ako vrijedi

$$Ax = \lambda x,$$

onda iz $B = S^{-1}AS$ izlazi da je $A = SBS^{-1}$, pa mora vrijediti i

$$SBS^{-1}x = \lambda x.$$

Pomnožimo li prethodnu relaciju slijeva sa S^{-1}, dobivamo da je

$$B(S^{-1}x) = \lambda(S^{-1}x).$$

Obratnim čitanjem dobivamo i drugu implikaciju.

Što se tiče lijevih svojstvenih vektora, rezultat se dobiva na sličan način. Neka vrijedi

$$y^*A = \lambda y^*.$$

Tada je

$$y^*SBS^{-1} = \lambda y^*.$$

Množenjem zdesna sa S dobivamo

$$(y^*S)B = \lambda(y^*S),$$

pa zaključujemo da je S^*y lijevi svojstveni vektor za B. Obratnim čitanjem dobijemo drugi smjer dokaza. □

Zadatak 1.5. Jesu li matrice koje imaju iste svojstvene vrijednosti slične, tj. vrijedi li na neki način 'obrat' gornjeg teorema?

Rješenje. Ne vrijedi, na primjer matrice

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{i} \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

imaju iste svojstvene vrijednosti (dvostruka svojstvena vrijednost 1), ali prva ima samo jedan desni svojstveni vektor e_1 i samo jedan lijevi svojstveni vektor e_2, dok druga matrica ima dva desna (e_1 i e_2) i dva lijeva svojstvena vektora (e_1 i e_2). Prema tome, matrice A i B ne mogu biti slične. □

Jedan od osnovnih teorema koji daje kanonsku strukturu matrice je Jordanov teorem, koji gotovo u potpunosti, karakterizira formu matrice najbližu dijagonalnoj za matrice koje se ne mogu dijagonalizirati.

Teorem 1.6 (Jordanova forma)**.** *Neka je A kvadratna matrica red n. Tada postoji nesingularna matrica S, takva da je*

$$S^{-1}AS = J,$$

pri čemu je J tzv. ***Jordanova forma****, tj. J je blok-dijagonalna,*

$$J = \operatorname{diag}(J_{n_1}(\lambda_1), J_{n_2}(\lambda_2), \ldots, J_{n_k}(\lambda_k)),$$

gdje je J_{n_i} matrica reda n_i,

$$J_{n_i}(\lambda_i) = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & & \\ & \lambda_i & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_i & 1 \\ & & & & \lambda_i \end{bmatrix}.$$

Matrica J je jedinstvena do na permutaciju dijagonalnih blokova.

Svaki J_{n_i} zove se **Jordanov blok** i njegova svojstvena vrijednost λ_i ima **algebarsku kratnost** n_i. Ako je $n_i = 1$ i λ_i se pojavljuje u samo jednom bloku, onda je λ_i jednostruka svojstvena vrijednost. Ako su sve svojstvene vrijednosti u matrici J jednostruke, onda je J dijagonalna, tj. A se može **dijagonalizirati**. Ako postoji barem jedan blok J_{n_i} reda barem 2, A je **defektna matrica**.

Bitno svojstvo defektnih matrica je da nemaju **punu bazu svojstvenih vektora**. Broj svojstvenih vektora za svojstvenu vrijednost λ zove se **geometrijska kratnost** svojstvene vrijednosti.

Ipak, mnoge se matrice mogu dijagonalizirati. Na primjer, kao posljedica Jordanovog teorema odmah je jasno da se mogu dijagonalizirati matrice koje imaju različite svojstvene vrijednosti. Nadalje, postoje i matrice, koje možda imaju iste svojstvene vrijednosti, a još uvijek se mogu dijagonalizirati. Najšira klasa takvih matrica su **normalne matrice**, tj. matrice za koje vrijedi

$$N^*N = NN^*.$$

Primjer 1.7. *Za matricu*

$$A = \begin{bmatrix} \frac{7}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{5}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{5}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{11}{4} & \frac{1}{4} \\ -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{7}{2} \end{bmatrix}$$

je

$$J = \left[\begin{array}{cc:ccc:c} 2 & 1 & & & & \\ & 2 & & & & \\ \hdashline & & 3 & 1 & & \\ & & & 3 & 1 & \\ & & & & 3 & \\ \hdashline & & & & & 2 \end{array}\right], \quad S = \begin{bmatrix} 1 & & & & & 1 \\ & 1 & & & & 1 \\ & & 1 & & & 1 \\ & & & 1 & & 1 \\ & & & & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Primijetite da 2 *nije jednostruka nego trostruka svojstvena vrijednost matrice* A.

Propozicija 1.8. *Jordanov blok* $J_{n_i}(\lambda_i)$ *ima samo jedan desni svojstveni vektor, i to je* e_1 *i samo jedan lijevi svojstveni vektor i to* e_{n_i}.

Dokaz. Neka je $J_{n_i}(\lambda_i)$ Jordanov blok za svojstvenu vrijednost λ_1,

$$J_{n_i}(\lambda_i) = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & & \\ & \lambda_i & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_i & 1 \\ & & & & \lambda_i \end{bmatrix}.$$

Da bi $x \neq 0$ bio svojstveni vektor za svojstvenu vrijednost λ_i, mora vrijediti da je

$$(J_{n_i}(\lambda_i) - \lambda_i I)x = 0,$$

odnosno,

$$(J_{n_i}(\lambda_i) - \lambda_i I)x = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 \\ & & & & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n_i-1} \\ x_{n_i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Odatle odmah slijedi da mora biti

$$x_2 = x_3 = \cdots = x_{n_i-1} = x_{n_i} = 0,$$

a $x_1 \neq 0$. Budući da ako je x svojstveni vektor, onda je to i μx, gdje je μ skalar, pa svojstveni vektor možemo normirati tako da mu je, recimo 2-norma jednaka 1. Prema tome, desni svojstveni vektor je e_1. Na sličan način zaključujemo i za lijeve svojstvene vektore. □

Ipak, Jordanova forma je dosta nekorisna u numeričkom računanju.

Primjer 1.9. *Neka je* $J_n(0)$ *Jordanov blok reda* n *za svojstvenu vrijednost* 0,

$$J_n(0) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 \\ & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Ako na dijagonalu na mjesto (i,i) dodamo $i \cdot \varepsilon$, pri čemu je $0 < \varepsilon \ll 1$, onda smo malom perturbacijom potpuno promijenili karakter matrice i umjesto $J_n(0)$ imamo

$$J_n'(0) = J_n(0) + \delta J_n(0) = \begin{bmatrix} \varepsilon & 1 & & & \\ & 2\varepsilon & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & (n-1)\varepsilon & 1 \\ & & & & n\varepsilon \end{bmatrix}.$$

Jordanova forma te malo perturbirane matrice je dijagonalna,

$$J_n'(0) = \operatorname{diag}(\varepsilon, 2\varepsilon, \ldots, (n-1)\varepsilon, n\varepsilon).$$

Drugi razlog što se ne koristi Jordanova forma je da se ona ne može ***stabilno*** *izračunati, tj. kad završimo s računanjem S i J, ne može se garantirati da vrijedi*

$$S^{-1}(A + \delta A)S = J$$

za neki mali δA.

Zbog svega navedenog, umjesto Jordanove forme, u numeričkom se računanju koristi **Schurova forma**. Umjesto nesingularne matrice S, koja može biti proizvoljno loše uvjetovana, koristit ćemo unitarnu matricu Q, samo dobivena forma više neće biti tako kompaktna.

Teorem 1.10 (Schurova kanonska forma)**.** *Neka je dana matrica A reda n. Tada postoje unitarna matrica Q i gornjetrokutasta matrica T takve da vrijedi*

$$Q^* A Q = T.$$

Svojstvene vrijednosti matrice A su dijagonalni elementi matrice T.

Dokaz. Dokaz je indukcijom po n, tj. redu matrice A. Za bazu indukcije uzmemo $n = 1$. Tada, očito, možemo uzeti $Q = Q^* = 1$.

Neka je λ proizvoljna svojstvena vrijednost, a u pripadni svojstveni vektor normiran tako da je $\|u\|_2 = 1$. Svojstveni vektor u se sigurno može dopuniti matricom $\widetilde{U}$ do unitarne matrice U,

$$U = [u, \widetilde{U}].$$

Tada vrijedi

$$U^* A U = \begin{bmatrix} u^* \\ \widetilde{U}^* \end{bmatrix} A [u, \widetilde{U}] = \begin{bmatrix} u^* A u & u^* A \widetilde{U} \\ \widetilde{U}^* A u & \widetilde{U}^* A \widetilde{U} \end{bmatrix}. \tag{1.1}$$

Budući da je u jedinični svojstveni vektor za svojstvenu vrijednost λ, imamo

$$u^* A u = u^* \lambda u = \lambda \|u\|_2^2 = \lambda.$$

Nadalje, vrijedi

$$\widetilde{U}^* A u = \widetilde{U}^* \lambda u = \lambda \cdot 0 = 0,$$

jer su stupci matrice $\widetilde{U}$ ortogonalni na u. Prema tome, relaciju (1.1) možemo pisati kao

$$U^*AU = \begin{bmatrix} \lambda & u^*A\widetilde{U} \\ 0 & \widetilde{U}^*A\widetilde{U} \end{bmatrix}.$$

Ako je vrijedila pretpostavka indukcije, da svaku matricu reda $n-1$ možemo napisati u traženoj formi, onda to možemo napraviti i s matricom $\widetilde{U}^*A\widetilde{U}$. Dakle,

$$\widetilde{U}^*A\widetilde{U} = P^*\widetilde{T}P,$$

pri čemu je P unitarna matrica, a $\widetilde{T}$ gornjetrokutasta. Uvrštavanjem u prethodnu jednadžbu, imamo

$$U^*AU = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & u^*A\widetilde{U}P \\ 0 & \widetilde{T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P^* \end{bmatrix},$$

čime je teorem dokazan. □

Uočimo da Schurova forma nije jedinstvena, jer svojstvene vrijednosti se na dijagonali mogu pojaviti u bilo kojem poretku.

Nadalje, Schurova forma može voditi na kompleksnu gornjetrokutastu matricu T, čak i onda kad je A realna. Zbog efikasnosti računanja uvodi se realna Schurova forma.

Teorem 1.11 (Realna Schurova kanonska forma)**.** *Ako je A realna matrica reda n, postoji ortogonalna matrica V takva da je*

$$V^TAV = T,$$

gdje je T realna blok-gornjetrokutasta s dijagonalnim blokovima 1×1 ili 2×2. Njezine svojstvene vrijednosti su svojstvene vrijednosti dijagonalnih blokova, s time da realne svojstvene vrijednosti odgovaraju 1×1 blokovima, a konjugirano-kompleksni parovi odgovaraju 2×2 blokovima.

Dokaz. Slično kao u prethodnom teoremu, dokaz je indukcijom. Ako je λ realna svojstvena vrijednost, korak u dokazu ekvivalentan je onome u prethodnom teoremu. Prema tome, pretpostavimo da je λ kompleksna svojstvena vrijednost. Tada je njezin svojstveni vektor u nužno kompleksan. Neka je

$$Au = \lambda u.$$

Konjugiranjem prethodne relacije dobivamo

$$\overline{Au} = \overline{A}\bar{u} = A\bar{u}.$$

S druge strane, vrijedi

$$\overline{Au} = \overline{\lambda u} = \bar{\lambda}\bar{u}.$$

Iz posljednje dvije relacije odmah izlazi da je $(\bar{\lambda}, \bar{u})$ također svojstveni par, za A, jer je $\overline{A} = A$, pa je

$$A\bar{u} = \bar{\lambda}\bar{u}.$$

Neka je u_R realni, a u_I imaginarni dio vektora u:

$$u_R = \frac{1}{2}(u + \bar{u}), \quad u_I = \frac{1}{2i}(u - \bar{u}).$$

Očito, tada vrijedi da u i $\bar{u}$ razapinju isti potprostor kao i u_R i u_I i to je dvodimenzionalni potprostor za koji tvrdimo da je invarijantni potprostor. Sjetimo se, za potprostor X reći ćemo da je invarijantan za A ako vrijedi

$$AX \subseteq X,$$

tj. ako za svaki $x \in X$ vrijedi da je $Ax \in X$.

Svaki vektor $x \in X$, $X = \operatorname{span}\{u, \bar{u}\}$ možemo napisati kao

$$x = \alpha u + \beta \bar{u},$$

pri čemu su α i β skalari. Tada vrijedi

$$Ax = A(\alpha u + \beta \bar{u}) = \alpha \lambda u + \beta \bar{\lambda} \bar{u},$$

pa je to opet linearna kombinacija vektora iz X. Označimo realnu matricu

$$\widetilde{U} = [u_R, u_I],$$

i napravimo (skraćenu) QR faktorizaciju matrice $\widetilde{U}$ (onu koja ima samo dva stupca). Tada vrijedi

$$\operatorname{span}\{Q\} = \operatorname{span}\{u_R, u_I\},$$

pa je i to invarijantan potprostor. Izaberimo $\widetilde{Q}$ tako da Q dopunimo do ortogonalne baze, U tj.

$$U = [Q, \widetilde{Q}].$$

Tada vrijedi

$$U^T A U = \begin{bmatrix} Q^T \\ \widetilde{Q}^T \end{bmatrix} A [Q, \widetilde{Q}] = \begin{bmatrix} Q^T A Q & Q^T A \widetilde{Q} \\ \widetilde{Q}^T A Q & \widetilde{Q}^T A \widetilde{Q} \end{bmatrix}. \tag{1.2}$$

Budući da Q razapinje invarijantni potprostor, postoji 2×2 matrica B takva da vrijedi

$$AQ = QB.$$

Onda blokove u (1.2) možemo napisati kao

$$\begin{aligned} Q^T A Q &= Q^T Q B = B, \\ \widetilde{Q}^T A Q &= \widetilde{Q}^T Q B = 0. \end{aligned}$$

Prema tome, izlazi

$$U^T A U = \begin{bmatrix} B & Q^T A \widetilde{Q} \\ 0 & \widetilde{Q}^T A \widetilde{Q} \end{bmatrix}.$$

Sada iskoristimo korak indukcije na matrici $\widetilde{Q}^T A \widetilde{Q}$. $\square$

Konačno, ako smo matricu doveli u Schurovu kanonsku formu, svojstvene vrijednosti lako čitamo s njezine dijagonale. Pitanje je kako ćemo pronaći njezine svojstvene vektore. Iz sličnosti znamo da su svojstveni vektori matrice T i matrice A jednostavno vezani, tj. ako je

$$Tx = \lambda x,$$

onda je

$$AQx = QTx = \lambda Qx,$$

pa je Qx svojstveni vektor matrice A.

Ostaje nam samo pročitati svojstvene vektore matrice T iz njezine trokutaste forme. Jednostavnosti radi pretpostavimo da tražimo svojstveni vektor za jednostruku svojstvenu vrijednost $\lambda = t_{ii}$. Napišimo linearni sustav za svojstvene vektore $(T - \lambda I)x = 0$ u blok formi

$$0 = \begin{bmatrix} T_{11} - \lambda I & T_{12} & T_{13} \\ 0 & 0 & T_{23} \\ 0 & 0 & T_{33} - \lambda I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (T_{11} - \lambda I)x_1 + T_{12}x_2 + T_{13}x_3 \\ T_{23}x_3 \\ (T_{33} - \lambda I)x_3 \end{bmatrix},$$

pri čemu je T_{11} matrica reda $i - 1$, $T_{22} = 0$ reda 1, a T_{33} reda $(n - i)$. Blok vektori x_1, x_2 i x_3 redom odgovaraju dimenzijama matrica T_{11}, T_{22} i T_{33}.

Budući da je λ jednostruka, onda su matrice $T_{33} - \lambda I$ i $T_{11} - \lambda I$ nesingularne, pa iz posljednje blok-jednadžbe slijedi da mora biti

$$x_3 = 0,$$

a iz prve blok jednadžbe slijedi da je

$$(T_{11} - \lambda I)x_1 = -T_{12}x_2. \tag{1.3}$$

Primijetimo da x_2 možemo proizvoljno odabrati, tako da vektor x nije nul-vektor. Recimo, uzmimo $x_2 = 1$. Tada izlazi da je

$$x_1 = -(T_{11} - \lambda I)^{-1}T_{12}.$$

Prema tome, svojstveni vektor za svojstvenu vrijednost λ je

$$x = \begin{bmatrix} -(T_{11} - \lambda I)^{-1}T_{12} \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Drugim riječima, da bismo dobili svojstveni vektor x, moramo riješiti trokutasti linearni sustav (1.3) za x_1. Računanje svojstvenog vektora za kompleksnu svojstvenu vrijednost zahtijeva rješavanje blok-gornjetrokutastog sustava.

1.2. Metode za nesimetrični problem svojstvenih vrijednosti

U ovom poglavlju, zbog jednostavnosti pretpostavljamo da je matrica A uvijek realna. Prvo ćemo opisati osnovne metode koje računaju jednu ili više svojstvenih vrijednosti, a onda metode koje računaju sve svojstvene vrijednosti matrice A.

1.2.1. Metoda potencija

Metoda potencija koristi se za računanje spektralnog radijusa matrice, a njezina je paralelizacija vrlo jednostavna. Posebno je ima smisla spominjati kao uvod u **metodu inverznih iteracija**.

Pretpostavimo da je matrica A dijagonalna,

$$A = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n),$$

uz uvjet da za svojstvene vrijednosti matrice A vrijedi

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

Primijetimo da su tada svojstveni vektori matrice A vektori e_i, $i = 1, \ldots, n$, tj. svi vektori kanonske baze. Ako je zadan startni vektor x_0, pogledajmo što možemo zaključiti o normiranim vektorima

$$x_i = \frac{A^i x_0}{\|A^i x_0\|_2}.$$

Za smjer vektora x_i dovoljno je gledati samo brojnik, jer nazivnik samo normira vektor, ali ne mijenja smjer. Neka su komponente vektora x_0

$$x_0 = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix},$$

s tim da pretpostavljamo da je $\xi_1 \neq 0$. Tada, ako znamo da je

$$A^i = \operatorname{diag}(\lambda_1^i, \lambda_2^i, \ldots, \lambda_n^i),$$

imamo

$$A^i x_0 = A^i \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1^i \xi_1 \\ \lambda_2^i \xi_2 \\ \vdots \\ \lambda_n^i \xi_n \end{bmatrix} = \lambda_1^i \xi_1 \begin{bmatrix} 1 \\ \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^i \frac{\xi_2}{\xi_1} \\ \vdots \\ \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^i \frac{\xi_n}{\xi_1} \end{bmatrix}.$$

Po pretpostavci o tome da je λ_1 **jedinstvena** po aspolutnoj vrijednosti najveća svojstvena vrijednost, izlazi da je

$$\lim_{i \to \infty} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_1}\right)^i \frac{\xi_k}{\xi_1} = 0, \quad k = 2, \ldots, n.$$

Drugim riječima, vrijedi

$$\lim_{i\to\infty} \frac{A^i x_0}{\|A^i x_0\|_2} = e_1,$$

tj. $A^i x_0$ konvergira prema svojstvenom vektoru za λ_1.

Da bismo analizirali općenitiji slučaj, pretpostavimo da se A može dijagonalizirati, tj. da vrijedi

$$A = S\Lambda S^{-1}, \tag{1.4}$$

a da su svojstvene vrijednosti poredane kao i prije, tj. da je

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

Uočimo da iz jednadžbe (1.4) slijedi da su stupci od S svojstveni vektori od A (jednostavno, (1.4) napiše se kao $AS = S\Lambda$). Za stupce od S možemo pretpostaviti da su normirani.

Ponovno, neka je x_0 proizvoljni vektor (uz malu pretpostavku na njegovu prvu komponentu). Tada ga, koristeći S možemo napisati kao

$$x_0 = S(S^{-1}x_0) = S \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix}.$$

Jedina pretpostavka koju ćemo staviti je da je $\xi_1 \neq 0$. Ako nije, izaberemo neki drugi vektor x_0. Nadalje, budući da je $A = S\Lambda S^{-1}$, vrijedi

$$A^i = (S\Lambda S^{-1})(S\Lambda S^{-1})\cdots(S\Lambda S^{-1}) = S\Lambda^i S^{-1}.$$

Ponovno, pogledajmo što se događa s potencijama matrice A,

$$A^i x_0 = (S\Lambda^i S^{-1}) S \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} \lambda_1^i \xi_1 \\ \lambda_2^i \xi_2 \\ \vdots \\ \lambda_n^i \xi_n \end{bmatrix} = \lambda_1^i \xi_1 S \begin{bmatrix} 1 \\ \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^i \frac{\xi_2}{\xi_1} \\ \vdots \\ \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^i \frac{\xi_n}{\xi_1} \end{bmatrix}.$$

Ponovno zaključujemo da će posljednji vektor konvergirati prema e_1, pa imamo

$$\lim_{i\to\infty} \frac{A^i x_0}{\|A^i x_0\|_2} = Se_1 = s_1,$$

tj. ponovno potencije konvergiraju prema svojstvenom vektoru za svojstvenu vrijednost λ_1.

Dakle, metodom potencija smo lako izračunali svojstveni vektor za jedinstvenu po apsolutnoj vrijednosti najveću svojstvenu vrijednost matrice A. Svojstvenu vrijednost λ_1 lako ćemo izračunati iz

$$As_1 = \lambda_1 s_1.$$

Budući da je s_1 normiran, onda množenjem slijeva sa s_1^T dobivamo

$$s_1^T A s_1 = \lambda_1 s_1^T s_1 = \lambda_1 \|s_1\|_2^2 = \lambda_1.$$

Metoda potencija ima nekoliko loših osobina:

1. ovakva analiza neće raditi ako je najveća (po vrijednosti) svojstvena vrijednost kompleksna (ima svoj konjugirano-kompleksni par),
2. brzina konvergencije ovisi o omjeru λ_2/λ_1, i sporija je što je taj omjer veći,
3. metoda konvergira uvijek samo prema (po apsolutnoj vrijednosti) najvećoj svojstvenoj vrijednosti.

Primijetimo da bismo korištenjem realnog pomaka σ (engl. shift) za matricu A, eventualno mogli dobiti samo još i po apsolutnoj vrijednosti najmanju svojstvenu vrijednost, ali ne i one između. Naime, svojstvene vrijednosti matrice $A - \sigma I$ su $\lambda_i - \sigma$.

Algoritam 1.12 (Metoda potencija)**.** *Za dani vektor x_0 i danu toleranciju ε iteriramo*

```
y = x_0
converged = false
while not converged do
   x = y/‖y‖_2
   y = Ax
   λ = x^T y
   converged = (‖y − λx‖_2 < ελ)
end while
```

Postoji nekoliko nivoa paralelizacije metode potencija, od računanja normi, umnoška matrice na vektor Ay i skalarnog produkta, do eventualnog korištenja paralelnog prefiksa kojim se mogu računati željene potencije matrice A.

1.2.2. Metoda inverznih iteracija

Ako metodu potencija primijenimo na matricu $(A - \sigma I)^{-1}$, dobili smo **metodu inverznih iteracija**, a vektor koji iteriramo konvergirat će prema svojstvenom vektoru svojstvene vrijednosti koja je najbliža σ.

Neka se A, kao i prije, može dijagonalizirati, tj. postoji nesingularni S takav da je $A = S\Lambda S^{-1}$. Tad vrijedi i

$$A - \sigma I = S\Lambda S^{-1} - \sigma S S^{-1} = S(\Lambda - \sigma I)S^{-1}.$$

Ako je σ nije svojstvena vrijednost od A, invertiranjem lijeve i desne strane dobivamo

$$(A - \sigma I)^{-1} = S(\Lambda - \sigma I)^{-1} S^{-1},$$

pa se odmah vidi da A i $(A - \sigma I)^{-1}$ imaju **iste** svojstvene vektore, a odgovarajuće svojstvene vrijednosti su $(\lambda_j - \sigma)^{-1}$.

Slična analiza kao kod metode potencija pokazuje da ako startamo od vektora x_0, on će konvergirati svojstvenom vektoru koji odgovara po apsolutnoj vrijednosti najvećoj svojstvenoj vrijednosti matrice $(A - \sigma I)^{-1}$. Jasno je da je

$$\max_{j=1,\ldots,n} \frac{1}{|\lambda_j - \sigma|} = \frac{1}{\min\limits_{j=1,\ldots,n} |\lambda_j - \sigma|},$$

tj. metoda će konvergirati prema svojstvenoj vrijednosti koja je najbliža σ. Nazovimo tu najbližu svojstvenu vrijednost λ_k.

Analizirajmo brzinu konvergencije metode. Ponovno, neka je

$$x_0 = S \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix}$$

i neka je $\xi_k \neq 0$. Tada je

$$(A-\sigma I)^{-i} x_0 = (S(\Lambda-\sigma)^{-i} S^{-1}) S \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} \frac{\xi_1}{(\lambda_1-\sigma)^i} \\ \frac{\xi_2}{(\lambda_2-\sigma)^i} \\ \vdots \\ \frac{\xi_n}{(\lambda_n-\sigma)^i} \end{bmatrix} = \frac{\xi_k}{(\lambda_k - \sigma)^i} S \begin{bmatrix} \left(\frac{\lambda_k-\sigma}{\lambda_1-\sigma}\right)^i \frac{\xi_1}{\xi_k} \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ \left(\frac{\lambda_k-\sigma}{\lambda_n-\sigma}\right)^i \frac{\xi_n}{\xi_k} \end{bmatrix}.$$

Budući da je λ_k najbliža σ, onda je

$$\left| \frac{\lambda_k - \sigma}{\lambda_j - \sigma} \right| < 1,$$

pa posljednji vektor u prethodnoj relaciji teži k e_k za $i \to \infty$. Preciznije rečeno,

$$\lim_{i\to\infty} \frac{(A - \sigma I)^{-i} x_0}{\|(A - \sigma I)^{-i} x_0\|} = S e_k = s_k,$$

pa imamo konvergenciju prema svojstvenom vektoru koji pripada svojstvenoj vrijednosti λ_k. Kad znamo s_k, jednostavno je izračunati i λ_k, $\lambda_k = s_k^T A s_k$.

Dobra osobina metode inverznih iteracija je da se pažljivim biranjem pomaka σ može doći do proizvoljne svojstvene vrijednosti. Naravno, dobar izbor pomaka σ može bitno ubrzati konvergenciju.

Algoritam 1.13 (Metoda inverznih iteracija)**.** *Za dani vektor x_0 i danu toleranciju ε iteriramo*

$y = x_0$
converged $=$ *false*
while not *converged* **do**
  $x = y/\|y\|_2$

$(A - \sigma I)y = x$ /* linearni sustav! */
$\theta = x^T y$
$converged = (\|y - \theta x\|_2 < \varepsilon\theta)$
end while
$x = y/\theta$
$\lambda = \sigma + 1/\theta$ ili $\lambda = x^T A x$

Paralelizacija metode inverznih iteracija je očita i dvojaka. Prvo, ako se želi računati istovremeno više svojstvenih vrijednosti koje su bliske različitim vrijednostima σ, onda su ti procesi idealno paralelni. Nadalje, rješavanje linearnog sustava koji treba riješiti u svakoj iteraciji, može se paralelizirati.

1.2.3. Ortogonalne iteracije ili iteracije potprostora

Ortogonalne iteracije ili **iteracije potprostora** (engl. subspace iteration) su generalizacija metode potencija koja iterira p-dimenzionalni potprostor, umjesto jednodimenzionalnog potprostora. Naravno, time ćemo umjesto svojstvenog vektora koji odgovara po apsolutnoj vrijednosti najvećoj svojstvenoj vrijednosti, dobiti invarijantni potprostor koji odgovara svojstvenim vektorima za p po apsolutnoj vrijednosti najvećih svojstvenih vrijednosti.

Pretpostavimo da je matrica A takva da za njezine svojstvene vrijednosti vrijedi

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq |\lambda_p| > |\lambda_{p+1}| \geq \cdots \geq |\lambda_n|.$$

Prvi problem je kako odabrati p-dimenzionalni potprostor. Najjednostavniji je način uzeti p ortogonalnih vektora. Dakle, neka je Z matrica startnih p vektora. Napravimo (skraćenu) QR faktorizaciju matrice Z,

$$Z = \widetilde{Q}_0 R_0.$$

Ako su vektori u Z bili linearno nezavisni, onda matrica $\widetilde{Q}_0$ razapinje p-dimenzionalni (ortogonalni) potprostor. Nakon toga izračunamo potenciju matrice A na $\widetilde{Q}_0$,

$$Y_1 = A\widetilde{Q}_0.$$

Ako od matrice Y_1 napravimo (skraćenu) QR faktorizaciju

$$Y_1 = \widetilde{Q}_1 R_1,$$

onda zaključujemo da kad bi bilo $Q := \widetilde{Q}_0 = \widetilde{Q}_1$, onda bi one bile invarijantni potprostor od A, jer bi bilo

$$AQ = QR_1.$$

Generalno, u i-tom koraku računamo

$$Y_{i+1} = A\widetilde{Q}_i, \quad Y_{i+1} = \widetilde{Q}_{i+1} R_{i+1}.$$

Napravimo opet neformalnu analizu metode. Uočimo da zbog prethodne relacije vrijedi

$$\operatorname{span}\{\widetilde{Q}_{i+1}\} = \operatorname{span}\{Y_{i+1}\} = \operatorname{span}\{A\widetilde{Q}_i\}.$$

Budući da je

$$\operatorname{span}\{\widetilde{Q}_i\} = \operatorname{span}\{A^i\widetilde{Q}_0\} = \operatorname{span}\{S\Lambda^i S^{-1}\widetilde{Q}_0\},$$

onda imamo

$$S\Lambda^i S^{-1}\widetilde{Q}_0 = S\operatorname{diag}(\lambda_1^i, \ldots \lambda_n^i)S^{-1}\widetilde{Q}_0 = \lambda_p^i S \begin{bmatrix} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_p}\right)^i & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_p}\right)^i \end{bmatrix} S^{-1}\widetilde{Q}_0.$$

Budući da je $\left|\frac{\lambda_j}{\lambda_p}\right| < 1$ za $j > p$, onda donji dio dijagonalne matrice u prethodnoj relaciji konvergira u nulu. Preciznije

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_p}\right)^i & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_p}\right)^i \end{bmatrix} S^{-1}\widetilde{Q}_0 = \begin{bmatrix} V_i^{p\times p} \\ W_i^{(n-p)\times p} \end{bmatrix},$$

i pritom $W_i^{(n-p)\times p}$ teži prema nul-matrici. Ako je $V_0^{p\times p}$ imala puni rang (generalizacija $\xi_1 \neq 0$), onda i $V_i^{p\times p}$ ima puni rang.

Sada matricu svojstvenih vektora S, možemo particionirati na prvi "komad" od p svojstvenih vektora $S_p^{n\times p}$ i zadnji komad od $n-p$, $\widehat{S}_p^{n\times(n-p)}$ svojstvenih vektora

$$S = [s_1, \ldots, s_p, s_{p+1}, \ldots, s_n] = [S_p^{n\times p}, \widehat{S}_p^{n\times(n-p)}].$$

Tada vrijedi

$$S\Lambda^i S^{-1}\widetilde{Q}_0 = \lambda_p^i S \begin{bmatrix} V_i^{p\times p} \\ W_i^{(n-p)\times p} \end{bmatrix} = \lambda_p^i (S_p^{n\times p} V_i^{p\times p} + \widehat{S}_p^{n\times(n-p)} W_i^{(n-p)\times p}).$$

Budući da vrijedi

$$\begin{aligned} \operatorname{span}\{\widetilde{Q}_i\} &= \operatorname{span}\{A^i\widetilde{Q}_0\} = \operatorname{span}\{S\Lambda^i S^{-1}\widetilde{Q}_0\} \\ &= \operatorname{span}\{(S_p^{n\times p} V_i^{p\times p} + \widehat{S}_p^{n\times(n-p)} W_i^{(n-p)\times p})\}, \end{aligned}$$

očito je da na limesu, zbog $W_i^{(n-p)\times p} \to 0$, vrijedi

$$\operatorname{span}\{\widetilde{Q}_i\} \to \operatorname{span}\{S_p^{n\times p} V_i^{p\times p}\} = \operatorname{span}\{S_p^{n\times p}\}$$

jer je $V_i^{p\times p}$ punog ranga. Drugim riječima time smo dokazali željenu tvrdnju da $\widetilde{Q}_i$ konvergira prema invarijantnom potprostoru razapetom s prvih p svojstvenih vektora.

Nadalje, primijetimo, ako smo uzeli prvih $\tilde{p} < p$ vektora, onda ortogonalne iteracije s p vektora restringirane samo na početni komad od $\tilde{p}$ vektora rade jednako kao da smo počeli s $\tilde{p}$ vektora.

Algoritam 1.14 (Metoda ortogonalnih iteracija)**.** *Za p nezavisnih vektora Z i danu toleranciju ε iteriramo*

$Z = \widetilde{Q}_0 R_0$
$i = 0$
repeat
  $Y_{i+1} = A\widetilde{Q}_i$
  factorize $Y_{i+1} = \widetilde{Q}_{i+1} R_{i+1}$ /* $\widetilde{Q}_{i+1}$ razapinje aproks. invarijantni potp. */
  $i = i + 1$
until convergence

Naravno, algoritam ortogonalnih iteracija možemo raditi i za $p = n$. Tada za početnu matricu Z možemo uzeti $Z = I$, pa za nju ne moramo raditi početnu QR faktorizaciju ($\widetilde{Q}_0 = I$, $R_0 = I$). Sljedeći teorem daje uvjete pod kojima ortogonalne iteracije konvergiraju prema Schurovoj formi matrice A.

Teorem 1.15. *Neka je matrica A reda n i započnimo ortogonalne iteracije za $p = n$ s početnom matricom $Z = I$. Ako su sve svojstvene vrijednosti matrice A različite po apsolutnoj vrijednosti i ako sve glavne podmatrice $S(1 : j, 1 : j)$ imaju puni rang, onda $A_i := \widetilde{Q}_i^T A \widetilde{Q}_i$ konvergira prema Schurovoj formi od A, tj. prema gornjetrokutastoj matrici sa svojstvenim vrijednostima na dijagonali. Svojstvene vrijednosti će na dijagonali biti posložene u padajućem poretku po apsolutnoj vrijednosti.*

I u ovom algoritmu je paralelizacija jasna. Prvo, može se paralelizirati matrično množenje $Y_{i+1} = A\widetilde{Q}_i$, a zatim se može paralelizirati i QR faktorizacija $Y_{i+1} = \widetilde{Q}_{i+1} R_{i+1}$.

1.2.4. QR iteracije

Sljedeći cilj je napraviti pandan metodi inverznih iteracija, tj. reorganizirati ortogonalne iteracije tako da upotrijebimo "invertiranje" i pomicanje. Time ćemo dobiti jednu od najpoznatijih metoda za računanje svojstvenih vrijednosti matrica koju su nezavisno otkrili John Francis i Vera Kublanovskaja 1961–1962.

Algoritam 1.16 (QR algoritam)**.** *Za danu matricu A_0 iteriramo*

$i = 0$
repeat
  factorize $A_i = Q_i R_i$ /* QR faktorizacija */
  $A_{i+1} = R_i Q_i$
  $i = i + 1$
until convergence

Propozicija 1.17. *Sve matrice A_i dobivene prethodnim algoritmom su ortogonalno slične matrici A_0.*

Dokaz. Budući da je $Q_i^T A_i = R_i$, uvrštavanjem u relaciju za A_{i+1} dobivamo

$$A_{i+1} = Q_i^T A_i Q_i. \qquad \square$$

Zgodna je veza između ortogonalnih iteracija i QR algoritma.

Teorem 1.18. *Neka je A_i matrica izračunata QR algoritmom. Istu matricu $A_i = \widetilde{Q}_i^T A \widetilde{Q}_i$ dobivamo i algoritmom ortogonalnih iteracija, ako smo algoritam započeli sa $Z = I$. Prema tome, A_i konvergira prema Schurovoj formi, ako su sve svojstvene vrijednosti različite po normi.*

Dokaz. Pretpostavimo da je

$$A_i = \widetilde{Q}_i^T A \widetilde{Q}_i.$$

Prema algoritmu ortogonalnih iteracija, imamo

$$A \widetilde{Q}_i = \widetilde{Q}_{i+1} R_{i+1},$$

gdje je $\widetilde{Q}_{i+1}$ ortogonalna, a R_{i+1} gornjetrokutasta. Tada je

$$\widetilde{Q}_i^T A \widetilde{Q}_i = \widetilde{Q}_i^T (\widetilde{Q}_{i+1}^T R_{i+1}) = (\widetilde{Q}_i^T \widetilde{Q}_{i+1}^T) R_{i+1} =: QR,$$

jer je QR faktorizacija jedinstvena do na znak. S druge strane imamo

$$\widetilde{Q}_{i+1}^T A \widetilde{Q}_{i+1} = (\widetilde{Q}_{i+1}^T A \widetilde{Q}_i)(\widetilde{Q}_i^T \widetilde{Q}_{i+1}) = R_{i+1} (\widetilde{Q}_i^T \widetilde{Q}_{i+1}) = RQ,$$

pa je to točno način kako QR algoritam iz A_i dobiva A_{i+1}. □

QR iteracije nikad se ne rade bez pomaka σ, jer se time ubrzava konvergencija.

Algoritam 1.19 (QR algoritam s pomakom)**.** *Za danu matricu A_0 iteriramo*

$i = 0$
repeat
  choose shift σ_i /* blizu svojstvene vrijednosti */
  factorize $A_i - \sigma_i I = Q_i R_i$ /* QR faktorizacija */
  $A_{i+1} = R_i Q_i + \sigma_i I$
  $i = i + 1$
until convergence

Propozicija 1.20. *Matrice A_{i+1} i A_i dobivene QR iteracijama s pomakom su slične.*

Dokaz. Iz $Q_i R_i = A_i - \sigma_i I$ izlazi da je $R_i = Q_i^T (A_i - \sigma_i I)$, pa onda izlazi

$$A_{i+1} = R_i Q_i + \sigma_i I = (Q_i^T (A_i - \sigma_i I)) Q_i + \sigma_i I = Q_i^T A_i Q_i. \qquad \square$$

Ako je σ_i stvarno svojstvena vrijednost, onda će QR iteracije u jednom jedinom koraku to otkriti. Ako je σ_i svojstvena vrijednost, onda je matrica $A - \sigma_i I$ singularna, pa se to mora vidjeti u matrici R_i, tj. barem joj jedan dijagonalni element mora biti jednak 0. Pretpostavimo da je to element $R_i(n, n)$. Tada je čitav zadnji redak jednak 0, pa je posljednji redak od $A_{i+1} = R_i Q_i + \sigma_i I$ jednak $\sigma_i e_n^T$. To znači da je algoritam konvergirao, matrica je reducibilna (dijagonalni blokovi su kvadratni, a blok na mjestu $(2, 1)$ je jednak 0,

$$A_{i+1} = \begin{bmatrix} A' & a \\ 0 & \sigma_i \end{bmatrix}.$$

Nakon toga posao se nastavlja na manjoj matrici A'. Taj postupak naziva se **deflacija**.

Ipak QR metoda **nikad** se ne radi na punoj matrici, jer je prespora. Problemi koje treba riješiti su:

1. QR faktorizacija pune matrice traje $\mathcal{O}(n^3)$ operacija po faktorizaciji. Kao što smo već rekli, svojstvenu vrijednost možemo otkriti u jednom koraku ako napravimo baš pomak σ_i koji je jednak toj svojstvenoj vrijednosti. Prema tome, ukupno trajanje QR iteracija bilo bi $\mathcal{O}(n^4)$, što je vrlo sporo.
2. Kako treba izabrati pomak σ_i da bi se ubrzala konvergencija u slučaju kompleksne svojstvene vrijednosti? Jasno je da se ne smije uzeti kompleksni pomak, jer će se time uvesti kompleksna aritmetika i bitno usporiti postupak.
3. Kako ćemo prepoznati konvergenciju prema realnoj Schurovoj formi?

1.3. Svođenje na Hessenbergovu formu

Da bismo efikasno proveli QR metodu, matricu je potrebno svesti na kompaktniju formu, a to je gornja **Hessenbergova forma**. Gornja Hessenbergova forma za nesimetričnu matricu je gornjetrokutasta matrica s još jednom sporednom dijagonalom (elementi kojima je indeks retka za 1 veći od indeksa stupca).

Svođenje na Hessenbergovu formu provodi se korištenjem ortogonalnih sličnosti, tj. traži se ortogonalna matrica Q takva da je QAQ^T gornja Hessenbergova. Ideja redukcije vrlo je slična QR faktorizaciji, samo se norma stupca, umjesto na dijagonalni element "nabacuje" na element ispod glavne dijagonale.

Pokažimo to na jednom 4×4 primjeru.

Primjer 1.21. *Neka je A matrica reda 4,*

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}.$$

Korištenjem, matrice

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 1 & \\ & H_1 \end{bmatrix},$$

pri čemu je H_1 Householderov reflektor, možemo poništiti elemente prvog stupca u matrici A, od mjesta 3 do n, pa imamo

$$Q_1 A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & a_{34}^{(1)} \\ 0 & a_{42}^{(1)} & a_{43}^{(1)} & a_{44}^{(1)} \end{bmatrix}.$$

Nakon toga primijenimo matricu Q_1^T zdesna, pa dobijemo

$$Q_1 A Q_1^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & a_{14}^{(2)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} \\ 0 & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} & a_{44}^{(2)} \end{bmatrix}.$$

Nakon toga biramo ortogonalnu matricu

$$Q_2 = \begin{bmatrix} I_2 & \\ & H_2 \end{bmatrix},$$

takvu da poništi elemente drugog stupca koji se nalaze od mjesta 4 *do* n*,*

$$Q_2 Q_1 A Q_1^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & a_{14}^{(2)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & a_{24}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(3)} & a_{33}^{(3)} & a_{34}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(3)} & a_{44}^{(3)} \end{bmatrix}.$$

Transformaciju Q_2^T *moramo primijeniti i zdesna*

$$Q_2 Q_1 A Q_1^T Q_2^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(4)} & a_{14}^{(4)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(4)} & a_{24}^{(4)} \\ 0 & a_{32}^{(3)} & a_{33}^{(4)} & a_{34}^{(4)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(4)} & a_{44}^{(4)} \end{bmatrix}.$$

Time smo završili postupak. Postupak smo mogli, umjesto Householderovim reflektorima provesti i Givensovim rotacijama.

Ako je matrica A bila **simetrična**, onda je simetrična i njezina Hessenbergova forma $Q_{n-2} \cdots Q_1 A Q_1^T \cdots Q_{n-2}^T$, pa je svođenje na Hessenbrgovu formu, zapravo **trodijagonalizacija**.

Nadalje, budući da koristimo Householderove reflektore, možemo koristiti činjenicu da su Hoseholderovi reflektori i sami simetrične matrice, pa je

$$Q_{n-2} \cdots Q_1 A Q_1^T \cdots Q_{n-2}^T Q_{n-2} \cdots Q_1 A Q_1 \cdots Q_{n-2}.$$

Teorem 1.22. *Hessenbergova forma se čuva u QR metodi.*

Dokaz. Ako je matrica $A_i - \sigma I$ bila gornja Hessenbergova, onda je njezina QR faktorizacija takva da je Q gornja Hessenbergova. To se najlakše vidi ako QR faktorizaciju provodimo rotacijama, pa ona redom zahvaće retke 1 i 2 u 1. stupcu, 2 i 3 u 2. stupcu, ...

Nakon toga, odmah se vidi da je i RQ gornja Hessenbergova, jer je to produkt gornje Hessenbergove i gornjetrokutaste matrice. □

1.3.1. Paralelno svođenje na Hessenbergovu formu

Da bismo mogli napraviti paralelni algoritam, moramo uočiti kojim se redom moraju ažurirati podaci.

Promotrimo k-ti korak u svođenju na Hessenbergovu formu, kad djelujemo matricom Q_k prvo slijeva, a onda zdesna.

1. Prvo moramo izračunati vektor v_k iz Householderovog reflektora
$$H_k = I - \frac{v_k v_k^T}{v_k^T v_k},$$
takav da ćemo time poništiti sve elemente k-tog stupca ispod $(k+1,k)$. Nakon toga stvarno poništimo elemente u k-tom stupcu.
2. Sada u paraleli možemo napraviti ažuriranje stupca $k+1$ do n matrice A (od redaka $k+1$ do n.
3. U paraleli, možemo ažurirati i zdesna prvih k redaka i to u stupcima $k+1$ do n.
4. Nakon što završi ažuriranje stupaca iz točke 2., možemo nastaviti s ažuriranjem redaka.

Grafički, (pišu brojevi koraka) navedeni proces izgleda ovako:

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 1 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} * & * & * & 3 & 3 & 3 \\ * & * & * & 3 & 3 & 3 \\ 0 & * & * & 3 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 & 2 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} * & * & * & 3 & 3 & 3 \\ * & * & * & 3 & 3 & 3 \\ 0 & * & * & 3 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 4 & 4 \end{bmatrix}$$

Opisani algoritam dosta je teško efikasno implementirati na računalu s razdijeljenom memorijom. Zadatak je samo nešto lakši na računalu sa zajedničkom memorijom.

1.3.2. Paralelna trodijagonalizacija

Kao i kod paralelnog svođenja na Hessenbergovu formu, kod paralelne trodijagonalizacije za simetične matrice, javlja se vrlo sličan problem. Naime i to je uglavnom sekvencijalan proces.

Jedna od ideja kako se to može napraviti je svođenje matrice na relativno usku vrpčastu strukturu (širina vrpce do 10), a zatim na trodijagonalnu matricu. Objasnimo još točno na kakvu vrpčastu matricu se misli u ovom kontekstu. Naime, širina vrpce nije jednoznačno definiran pojam.

Za matricu koja ima n_{b_l} dijagonala ispod glavne reći ćemo da je donjevrpčasta sa širinom vrpce n_{b_l}. Jednako tako za matricu koja ima n_{b_u} dijagonala iznad glavne dijagonale, reći ćemo da je gornjevrpčasta sa širinom vrpce n_{b_u}. Ako matrica ima i donje i gornje dijagonale, reći ćemo samo da je vrpčasta. U ovoj terminologiji, dijagonala se nigdje ne broji kao "vrpca".

1.4. QR iteracije s implicitnim pomakom

U ovom odjeljku pokazujemo kako možemo praktično raditi QR iteracije na gornjoj Hessenbergovoj matrici. Umjesto da eksplicitno konstruiramo matricu Q, konstrurat ćemo je eksplicitno kao prudukt Givensovih rotacija. Za tu konstrukciju potraban je implicitni Q teorem.

Nakon toga pokazat će se kako se radi jesnostruki pomak, a kako dvostruki (ako imamo konjugirano-kompleksni par svojstvanih vrijednosti, a da ipak ostanemo u domeni realne aritmetike).

1.4.1. Implicitni Q teorem

Teorem 1.23 (Implicitni Q teorem). *Neka je $Q^T AQ = H$ nereducirana gornja Hessenbergova matrica (nereducirana znači da na dijagonali ispod glavne nema niti jedna 0). Stupci matrice Q počevši od drugog do n-tog su (do na znak)* ***jednoznačno*** *određeni prvim stupcem matrice Q.*

Prethodni teorem (za dokaz vidjeti u Demmel, Applied Numerical Linear Algebra), pokazuje da za računanje $A_{i+1} = Q_i^T A_i Q_i$ u QR algoritmu trebamo samo

1. izračunati prvi stupac matrice Q_i, koji je proporcionalan prvom stupcu matrice $A_i - \sigma_i I$,
2. izabrati ostale stupce matrice Q_i tako da budu ortogonalni i da je A_{i+1} nereducirana Hessenbergova.

Korektnost algoritma izlazi iz implicitnog Q teorema, jer je matrice Q jedinstvena do na znak. Sam znak ne igra ulogu.

1.4.2. QR algoritam za nesimetrične matrice s jednostrukim pomakom

Ako je svojstvena vrijednost jednostruka, onda radimo tzv. jednostruki pomak (engl. single shift).

Promotrimo algoritam na matrici reda 6. Neka je zasad Q_1 matrica oblika

$$Q_1 = \begin{bmatrix} c_1 & -s_1 & & & & \\ s_1 & c_1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix},$$

i neka je A gornja Hessenbergova. Djelovanjem s Q_1^T slijeva i Q_1 zdesna, transformirana matrica A, u oznaci A_1 poprima sljedeći oblik

$$A_1 = Q_1^T A Q_1 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ \star & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix},$$

pritom $\star$ označava element koji je prije trensformacije bio 0, međutim djelovanjem trensformacije presto je biti 0. Sada tu "izbočinu" (engl. bulge) treba "istjerivatiti" (engl. chasing the bulge) izvan matrice i to tako da slijeva uzmemo rotaciju u $(2,3)$ ravnini koja će poništiti taj novostvoreni element. Naravno, istom rotacijom (samo transponiranom) moramo djelovati i zdesna. Novi Q_2 izgleda ovako

$$Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & c_2 & -s_2 & & & \\ & s_2 & c_2 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Nakon djelovanja s Q_2^T slijeva, dobivamo

$$A_2 = Q_2^T A_1 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix},$$

međutim, nakon primjene Q_2 zdesna, imamo

$$A_2 = Q_2^T A_1 Q_2 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & \star & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix},$$

što znači da se "izbočina" pomaknula jedno mjesto dolje i desno. U sljedećem koraku, poništimo tu izbočinu korištenjem Givensove rotacije u ravnini $(3,4)$,

$$Q_3 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & c_3 & -s_3 & & \\ & & s_3 & c_3 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Nakon djelovanja s q_2^T slijeva, dobivamo

$$A_3 = Q_3^T A_2 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix},$$

međutim, nakon primjene Q_3 zdesna, imamo

$$A_3 = Q_3^T A_2 Q_3 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & \color{red}{\star} & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}.$$

Postupak nastavljamo na isti način, tako da smo u sljedećem koraku stigli do

$$A_4 = Q_4^T A_3 Q_4 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & \color{red}{\star} & * & * \end{bmatrix}.$$

Sad još samo treba znati kako ćemo to posljednje izbočenje izbaciti izvan matrice. Djelovanjem rotacije u $(5,6)$ ravnini

$$Q_5 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & c_5 & -s_5 \\ & & & & s_5 & c_5 \end{bmatrix},$$

poništit ćemo posljednju izbočinu i matrica $A_5 = Q_5^T A_4 Q_5$ će ponovno biti u gornjoj Hessenbergovoj formi.

Primijetimo da je djelovanje na matricu A bilo ovim redom

$$Q^T A Q = (Q_1 Q_2 Q_3 Q_4 Q_5)^T A Q_1 Q_2 Q_3 Q_4 Q_5,$$

i da je dobivena matrica opet gornja Hessenbergova. Primijetimo izgled matrice Q,

$$Q = \begin{bmatrix} c_1 & * & * & * & * & * \\ s_1 & * & * & * & * & * \\ & s_2 & * & * & * & * \\ & & s_3 & * & * & * \\ & & & s_4 & * & * \\ & & & & s_5 & * \end{bmatrix}.$$

Već smo zaključili da prvi stupac od Q određuje do na znak sve ostale stupce u Q (implicitni Q teorem). Prvi stupca matrice Q izabrat ćemo tako da je proporcionalan s prvim stupcem $A - \sigma_1 I)$, tj. da je njegova norma. To znači da je naš Q jednak onome koji bi bio dobiven QR faktorizacijom od $A - \sigma I$.

1.4.3. QR algoritam za nesimetrične matrice s dvostrukim pomakom

Ako je svojstvena vrijednost kompleksna, onda ako želimo izvjeći kompleksnu aritmetiku, mora se narpaviti drugačija strategija pomaka. Ideja je u nizu napraviti pomak za σ i $\bar{\sigma}$

$$\begin{aligned} A_0 - \sigma I &= Q_1 R_1 & \qquad A_1 - \bar{\sigma} I &= Q_2 R_2 \\ A_1 &= R_1 Q_1 + \sigma I & A_2 &= R_2 Q_2 + \bar{\sigma} I. \end{aligned}$$

Odatle odmah izlazi da je

$$A_2 = Q_2^T Q_1^T A_0 Q_1 Q_2.$$

Lema 1.24. *Matrice Q_1 i Q_2 možemo izabrati tako da vrijedi*

(a) $Q_1 Q_2$ je realna,

(b) prvi stupac matrice $Q_1 Q_2$ se lako računa.

Dokaz. Redom, iz prve dvije transformacije izlazi

$$\begin{aligned} Q_1 Q_2 R_2 R_1 &= Q_1 (A_1 - \bar{\sigma} I) R_1 = Q_1 (R_1 Q_1 + (\sigma - \bar{\sigma}) I) R_1 \\ &= Q_1 R_1 Q_1 R_1 + (\sigma - \bar{\sigma})) Q_1 R_1 = (A_0 - \sigma I)^2 + (\sigma - \bar{\sigma}))(A_0 - \sigma I) =: M. \end{aligned}$$

Budući da je $\sigma - \bar{\sigma} \in \mathbb{R}$, onda je prethodna matrica realna, pa je $Q_1 Q_2 R_2 R_1$, QR faktorizacija realne matrice. Odatle je jasno da su i $Q_1 Q_2$ $R_2 R_1$ realne. Prvi stupac matrice $Q_1 Q_2$ je proporcionalan prvom stupcu matrice M, a ostali stupci se računaju korištenjem implicitnog Q teorema. □

I ovaj algoritam natjerava "izbočinu", samo je ona zbog dvostrukog pomaka 2×2 izbočina. Na primjer, neka je A ponovno matrica red 6. Ako zahtijevamo da je prvi stupca proporcionalan prvom stupcu matrice M, dobivamo

$$Q_1^T A = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ \star & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}$$

i

$$Q_1^T A Q_1 = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ \star & * & * & * & * & * \\ \star & \star & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{bmatrix}.$$

Sada vrlo slično kao u jednostrukom pomaku "izbočinu" pomičemo prema kraju matrice.

Izbor pomaka

Najčešće se pomak (engl. shift) bira kao svojstvene vrijednosti 2×2 matrice u donjem lijevom kutu, tj. kao svojstvene vrijednosti matrice

$$\begin{bmatrix} a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{bmatrix}.$$

Ako su svojstvene vrijednosti realne, onda očekujemo konvergenciju prema dvjema svojstvenim vrijednostima na dnu matrice. Ako se pak radi o kompleksnim vrijednostima, onda očekujemo konvergenciju prema 2×2 bloku koji, zapravo, sadrži kompleksnu svojstvenu vrijednost i njezin konjugirano kompleksni par.

Nažalost, ovakav izbor se pokazao izvrsnim u praksi, ali može se dogoditi da ovakav izbor pomaka padne u praksi. Na primjer, to će se dogoditi za matricu

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Izbor pomaka za simetrični trodijagonalni QR

Za simetrični trodijagonalni QR algoritam, pomak se najčešće bira kao kao svojstvena vrijednost bloka

$$\begin{bmatrix} a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ a_{n-1,n} & a_{n,n} \end{bmatrix}.$$

koja je najbliža $a_{n,n}$. Taj izbor pomaka zove se **Wilkinsonov shift** i može se pokazati da su simetrične QR iteracije s tim pomakom kubično konvergentne za gotovo sve matrice A.

1.4.4. Paralelni QR algoritam

Postoji puno algoritama koji su pokušaji paralelizacije QR algoritma i za Hessenbergove i za trodijagonalne matrice. Algoritmi su podosta komplicirani i nisu naročito paralelizibilni, jer su neke stvari u QR algoritmu očito nužno sekvencijalne.

1.5. Metoda podijeli pa vladaj za simetrični svojstveni problem

Metodu **podijeli pa vladaj** otkrio je Cuppen 1981., a njezinu točnu implementaciju napravili su Gu i Eisenstat 1995. godine.

Metoda (uz diferencijalnu qd metodu) se smatra najbržom metodom za računanje svojstvenih vrijednosti matrica.

Prvo, pokažimo ideju za funkcioniranje metode. Neka je T trodijagonalna matrica oblika

$$T = \left[\begin{array}{cccc|cccc} a_1 & b_1 & & & & & & \\ b_1 & \ddots & \ddots & & & & & \\ & \ddots & a_{m-1} & b_{m-1} & & & & \\ & & b_{m-1} & a_m & b_m & & & \\ \hline & & & b_m & a_{m+1} & b_{m+1} & & \\ & & & & b_{m+1} & \ddots & \ddots & \\ & & & & & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & & & b_{n-1} & a_n \end{array}\right]$$

$$= \left[\begin{array}{cccc|cccc} a_1 & b_1 & & & & & & \\ b_1 & \ddots & \ddots & & & & & \\ & \ddots & a_{m-1} & b_{m-1} & & & & \\ & & b_{m-1} & a_m - b_m & & & & \\ \hline & & & & a_{m+1} - b_m & b_{m+1} & & \\ & & & & b_{m+1} & \ddots & \ddots & \\ & & & & & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & & & b_{n-1} & a_n \end{array}\right]$$

$$+ \left[\begin{array}{cccc|cccc} & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & & b_m & b_m & & & \\ \hline & & & b_m & b_m & & & \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} T_1 & 0 \\ \hline 0 & T_2 \end{array}\right] + b_m v v^T,$$

pri čemu je

$$v^T = [0, \ldots, 0, 1 | 1, 0, \ldots, 0].$$

Prema tome, odmah je jasno da se traženje svojstvenih vrijednosti metodom podijeli pa vladaj sastoji od dva tridijagonalna problema i njihovom efikasnom ažuriranju matricama ranga 1.

Dakle, svojstvene vrijednosti matrice T možemo izračunati ovako

$$\begin{aligned} T &= \begin{bmatrix} T_1 & \\ & T_2 \end{bmatrix} + b_m vv^T = \begin{bmatrix} Q_1\Lambda_1 Q_1^T & \\ & Q_2\Lambda_2 Q_2^T \end{bmatrix} + b_m vv^T \\ &= \begin{bmatrix} Q_1 & \\ & Q_2 \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} \Lambda_1 & \\ & \Lambda_2 \end{bmatrix} + b_m uu^T \right) \begin{bmatrix} Q_1^T & \\ & Q_2^T \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

gdje je

$$u = \begin{bmatrix} Q_1^T & \\ & Q_2^T \end{bmatrix} v = \begin{bmatrix} \text{posljednji stupac matrice } Q_1^T \\ \text{prvi stupac matrice } Q_2^T \end{bmatrix}.$$

Drugim riječima, treba naći svojstvene vrijednosti matrice

$$\widehat{D} = D + \rho uu^T,$$

pri čemu je D dijagonalna, $\rho = b_m$, a u je vektor.

Prvo pretpostavimo da je matrica $D - \lambda I$ nesingularna, pa karakteristični polinom matrice $\widehat{D}$ glasi

$$\det(D + \rho uu^T - \lambda I) = \det[(D - \lambda I)(I + \rho(D - \lambda I)^{-1}uu^T)].$$

Iz pretpostavke o nesingularnosti $D - \lambda I$, izlazi da mora biti

$$\det(I + \rho(D - \lambda I)^{-1}uu^T) = 0$$

kad god je λ svojstvena vrijednost. Nadalje, matrica $I + \rho(D - \lambda I)^{-1}uu^T$ je jedinična matrica plus matrica ranga 1, za koju se lako računa determinanta.

Lema 1.25. *Ako su x i y vektori, onda vrijedi*

$$\det(I + xy^T) = 1 + y^T x.$$

Dokaz. Matricu $I + xy^T$ možemo napisati u Jordanovoj formi kao

$$I + xy^T = S \operatorname{diag}(1 + \lambda, 1, \ldots, 1) S^{-1}.$$

Sada je

$$\det(I + xy^T) = \det(S \operatorname{diag}(1 + \lambda, 1, \ldots, 1) S^{-1}) = \det(\operatorname{diag}(1 + \lambda, 1, \ldots, 1)) = 1 + \lambda,$$

pri čemu je λ jedina svojstvena vrijednost matrice xy^T koja je različita od 0. Nadalje, zbroj elemenata na dijagonali matrice xy^T jednak je njezinom tragu, a taj trag je s jedne strane skalarni produkt vektora x i y, a s druge strane jednak je zbroju svih svojstvenih vrijednosti matrice xy^T. Međutim, sve svojstvene vrijednosti matrice, osim jedne jednake su 0, pa je taj trag baš jednak λ. □

Iz prethodne leme izlazi da je

$$\det(I + \rho(D - \lambda I)^{-1}uu^T) = 1 + \rho u^T(D - \lambda I)^{-1}u = 1 + \rho \sum_{i=1}^{n} \frac{u_i^2}{d_i - \lambda_i} =: f(\lambda).$$

Prethodna jednadžba obično se zove sekularna jednadžba, a vrijednosti za koje je $f(\lambda) = 0$ su svojstvene vrijednosti.

U najjednostavnijem slučaju su svi d_i različiti, s svi $u_i \neq 0$. Budući da je f monotona, onda će, recimo, Newtonova metoda za nalaženje nultočaka konvergirati, ali ta konvergencija može biti vrlo spora ako su d_i vrlo mali brojevi.

Lema 1.26. *Ako je α svojstvena vrijednost od $D + \rho uu^T$, onda je $(D - \alpha I)^{-1}u$ svojstveni vektor za tu svojstvenu vrijednost.*

Nažalost, prethodna formula za računanje svojstvenih vektora je numerički nestabilna, pa se oni računaju na drugi način.

Algoritam 1.27 (Podijeli pa vladaj)**.** *Za simetričnu trodijagonalnu matricu T svojstvene vrijednosti Λ i vektori Q, $T = Q\Lambda Q^T$ dobivaju se rekurzivnim algoritmom.*

proc dc_eig (T, Q, Λ)
if $n = 1$
    return $Q = 1$, $\Lambda = T$
else
    form $T = \begin{bmatrix} T_1 & \\ & T_2 \end{bmatrix} + b_m vv^T$
    call proc dc_eig (T_1, Q_1, Λ_1)
    call proc dc_eig (T_2, Q_2, Λ_2)
    form $\widehat{D} = D + \rho uu^T$ **from** Q_1, Λ_1, Q_2, Λ_2
    find eigenvalues Λ and **eigenvectors** Q' of $\widehat{D}$
    form $Q = \begin{bmatrix} Q_1 & \\ & Q_2 \end{bmatrix} \cdot Q'$
    return Q and Λ
end if

1.6. Bisekcija i inverzna iteracija

Metoda bisekcije služi za nalaže svojstvenih vrijednosti matrica u nekom zadanom interavalu $[a, b\rangle$. Teorem koji se koristi je Sylvesterov teorem o inerciji.

Definicija 1.28. *Inercija hermitske/simetrične matrice A je trojka (n, z, p), pri čemu je n broj negativnih, z broj nula, a p broj pozitivnih svojstvenih vrijednosti matrice A.*

Teorem 1.29 (Sylvesterov teorem o inerciji)**.** *Neka je A simetrična matrica, a X nesingularna. Onda matrice A i $X^T AX$ imaju istu inerciju.*

Ako gledamo inerciju matrice $A - wI$ to je trojka (n, z, p), pri čemu je n broj negativnih svojstvenih vrijednosti, z broj nula svojstvenih vrijednosti, a p broj pozitivnih svojstvenih vrijednosti te matrice. Na drugi način to možemo reći i ovako. n je broj svojstvenih vrijednosti matrice A koje su manje od w, n je broj svojstvenih vrijednosti matrice A koje su jednake w, dok je p broj svojstvenih vrijednosti matrice A koje su veće od w.

Označimo s n_b broj svojstvenih vrijednosti matrice A koje su manje od b, a s n_a broj svojstvenih vrijednosti matrice A koje su manje od a, odnosno n_b je broj negativnih svojstvenih vrijednosti matrice $A-bI$, a n_a je broj negativnih svojstvenih vrijednosti matrice $A - aI$.

Iz prethodnih razmatranja odmah slijedi da je broj svojstvenih vrijednosti matrice A u intervalu $[a, b\rangle$ jednak $n_b - n_a$. Preostaje jedino još vidjeti kako se to može izračunati. Ako napravimo LDL^T faktorizaciju matrice $A-wI$, onda odmah čitamo inerciju matrice $A - wI$, jer ona piše na dijagonali matrice D (L je donjetrokutasta matrica s jedinicama na dijagonali).

Označimo s br_neg(A, z) broj svojstvenih vrijednosti matrice A koji je manji od z.

Algoritam 1.30 (Metoda bisekcije)**.** *Za danu simetričnu matricu A nalazi sve svojstvene vrijednosti koje se nalaze unutar intervala $[a, b\rangle$, s tim da se sve svojstvene vrijednosti koje se razlikuju za manje od tol smatraju jednakima.*

$n_a =$ br_neg(A, a)
$n_b =$ br_neg(A, b)
if $n_a = n_b$ **quit** /* nema sv. vrijednosti unutar */
else
  put $[a, n_a, b, n_b]$ **onto** *work_list*
end if
    /* *work_list* je lista intervala za bisekciju */
while *work_list* $\neq \emptyset$ **do**
  remove $[low, n_{low}, up, n_{up}]$ **from** *work_list*
  if $up - low < tol$ **then**
    print "$n_{up} - n_{low}$ sv. vrijednosti u $[up, low\rangle$"
  else
    $mid = (up + low)/2$
    $n_{mid} =$ br_neg(A, mid)
    if $n_{mid} > n_{low}$

put $[low, n_{low}, mid, n_{mid}]$ **onto** *work_ list*
end if
if $n_{up} > n_{mid}$
put $[mid, n_{mid}, up, n_{up}]$ **onto** *work_ list*
end if
end if
end while