ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΕΣ ΣΠΟΥΔΕΣ ΣΤΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ (ΜΣΜ)

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΡΙΓΩΝΟΠΟΙΗΣΗ SCHUR ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

ΣΤΡΑΤΗΓΗ ΚΑΛΛΙΟΠΗ

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: ΜΠΟΥΚΑΣ ΑΝΔΡΕΑΣ

ΠΑΤΡΑ, ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟΣ 2022

Τριγωνοποίηση Schur και Εφαρμογές

Καλλιόπη Στρατήγη

Επιτροπή Επίβλεψης Διπλωματικής Εργασίας

Επιβλέπων Καθηγητής:
Ανδρέας Μπούκας
Μέλος Σ.Ε.Π - Ε.Α.Π.

Συν-Επιβλέπων Καθηγητής:
Μιχαήλ Ανούσης
Καθηγητής Πανεπιστημίου Αιγαίου

Πάτρα, Σεπτέμβριος 2022

Ευχαριστίες

Με την παράδοση της εργασίας αυτής ολοκληρώνεται ένα όμορφο ταξίδι γνώσης στα Μαθηματικά.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή μου κύριο Ανδρέα Μπούκα, για το θέμα που μου εμπιστεύτηκε και για την πολύτιμη βοήθεια του σε όλη την διάρκεια της συνεργασίας μας.

Επίσης, θέλω να ευχαριστήσω τον συνεπιβλέποντα καθηγητή κύριο Μιχαήλ Ανούση καθώς και όλους τους καθηγητές που είχα την τιμή να συναντήσω στις θεματικές ενότητες.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για την υποστήριξή τους και την υπομονή τους κατά την διάρκεια όλων αυτών των χρόνων που χρειάστηκε για να τελειώσω το μεταπτυχιακό μου.

Περίληψη

Στον μαθηματικό κλάδο της Γραμμικής Άλγεβρας, η τριγωνοποίηση ή αποσύνθεση Schur, που πήρε το όνομά της από τον Issai Schur, είναι μια αποσύνθεση πίνακα. Δηλώνει ότι κάθε τετραγωνικός πίνακας A είναι ορθογώνια όμοιος με έναν άνω τριγωνικό πίνακα που έχει τις ιδιοτιμές του A στην κύρια διαγώνιο. Ένας τρόπος για την εύρεση ενός τέτοιου πίνακα είναι με την εφαρμογή του αλγορίθμου QR. Στην Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα, ο αλγόριθμος ή επανάληψη QR είναι ένας αλγόριθμος ιδιοτιμών, δηλαδή μια διαδικασία για τον υπολογισμό των ιδιοτιμών και των ιδιοδιανυσμάτων ενός πίνακα. Ο αλγόριθμος QR αναπτύχθηκε στα τέλη της δεκαετίας του 1950 από τον John G. F. Francis και από τη Vera N. Kublanovskaya, δουλεύοντας ανεξάρτητα. Η βασική ιδέα είναι η εφαρμογή μιας παραγοντοποίησης QR, γράφοντας τον πίνακα ως γινόμενο ενός ορθογώνιου πίνακα και ενός άνω τριγωνικού πίνακα, πολλαπλασιάζοντας τους παράγοντες με την αντίστροφη σειρά και επαναλαμβάνοντας την διαδικασία αυτή.

Ο σκοπός αυτής της εργασίας είναι να εκθέσει την βασική θεωρία της τριγωνοποίησης Schur για $n \times n$ τετραγωνικούς πίνακες και να περιγράψει την εφαρμογή της με τη βοήθεια του αλγορίθμου QR. Η εργασία απαρτίζεται από πέντε κεφάλαια.

Στο **1ο κεφάλαιο** παρουσιάζονται βασικές έννοιες της Γραμμικής Άλγεβρας για πίνακες και μπλοκ πίνακες, απαραίτητες για την μελέτη των επόμενων κεφαλαίων.

Στο **2ο κεφάλαιο** δίνεται η θεωρία για τις ιδιοτιμές-ιδιοδιανύσματα και εξηγείται τι είναι η ομοιότητα πινάκων.

Στο **3ο κεφάλαιο** γίνεται αναφορά σε ορθομοναδιαίους πίνακες, στην QR παραγοντοποίηση και στην ορθομαναδιαία ομοιότητα.

Στο **4ο κεφάλαιο** διατυπώνεται και αποδεικνύεται το θεώρημα της τριγονοποίησης Schur όπως και οι συνέπειες του.

Τέλος, στο **5ο κεφάλαιο** περιγράφεται πως ο αλγόριθμος QR καταλήγει στη μορφή Schur και οι τρόποι βελτίωσείς του.

Abstract

In the mathematical discipline of linear algebra, the Schur triangularization or decomposition, named after Issai Schur, is a matrix decomposition. States that every square matrix A is orthogonally similar to an upper triangular matrix that has the eigenvalues of A on the main diagonal. A way to find such a matrix is by applying the QR algorithm. In numerical linear algebra, the QR algorithm or QR iteration is an eigenvalue algorithm, that is, a procedure to calculate the eigenvalues and eigenvectors of a matrix. The QR algorithm was developed in the late 1950s by John G. F. Francis and by Vera N. Kublanovskaya, working independently. The basic idea is to perform a QR decomposition, write the matrix as a product of an orthogonal matrix and an upper triangular matrix, multiply the factors in the reverse order and repeat this process.

The purpose of this paper is to present the basic theory of Schur triangularization for $n \times n$ square matrices and to describe its application using the QR algorithm. The thesis comprises of five chapters.

Chapter 1 presents basic concepts of linear algebra for matrices and block matrices, necessary for the study of the subsequent chapters.

In **chapter 2** the theory of eigenvalues-eigenvectors is given and the similarity of matrices is explained.

Chapter 3 refers to unitary matrices, QR factorization, and unitary similarity.

In **chapter 4** the Schur triangularization theorem is formulated and proved, as well as its consequences.

Finally, **chapter 5** describes how the QR algorithm ends up in the Schur form and how it can be improved.

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγικές Έννοιες για Πίνακες και Μπλοκ Πίνακες

Συμβολισμοί

- $M_{m,n}(\mathbb{C})$ (ή $M_{m,n}(\mathbb{R})$) είναι το σύνολο των $m \times n$ πινάκων με στοιχεία από το $\mathbb{C}$ (ή $\mathbb{R}$).
- $M_n(\mathbb{C})$ (ή $M_n(\mathbb{R})$) είναι το σύνολο των $n \times n$ τετραγωνικών πινάκων με στοιχεία από το $\mathbb{C}$ (ή $\mathbb{R}$).

1.1 Διαμερισμός Πινάκων

Ορισμός 1.1.1. **Διαμέριση (partition)** *ενός πίνακα ονομάζεται η αποσύνθεση του σε υποπίνακες έτσι ώστε κάθε στοιχείο του αρχικού πίνακα να ανήκει σε έναν μόνο από τους υποπίνακες του.*

1.1.1 Υποπίνακες

Ορισμός 1.1.2. *Έστω $A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$. Για σύνολα δεικτών $\alpha \subseteq \{1, \ldots, m\}$ και $\beta \subseteq \{1, \ldots, n\}$, ορίζουμε με $A[\alpha, \beta]$ τον υποπίνακα με τα στοιχεία που βρίσκονται στις γραμμές α και στις στήλες β του πίνακα A.*

Παράδειγμα 1.1.1. Για

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}$$

έχουμε

$$A[\{1, 3\}, \{1, 2, 3\}] = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}$$

Σημείωση. Αν $\alpha = \beta$ ο υποπίνακας $A[\alpha] = A[\alpha, \alpha]$ ονομάζεται **κύριος υποπίνακας (principal submatrix)** του A. Ένας $n \times n$ πίνακας έχει $\binom{n}{k}$ διακριτούς κύριους υποπίνακες μεγέθους k.

1.1.2 Διαμερίσεις, πίνακας μπλοκ και πολλαπλασιασμός πινάκων

Ορισμός 1.1.3. *Έστω $\alpha_1, \dots, \alpha_t$ αποτελούν μία διαμέριση του $\{1, \dots, m\}$ και $\beta_1, \dots, \beta_s$ αποτελούν μία διαμέριση του $\{1, \dots, n\}$, τότε οι πίνακες $A[\alpha_i, \beta_j]$ σχηματίζουν μια διαμέριση του πίνακα $A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$, με $1 \leq i \leq t$, $1 \leq j \leq s$. Αν $A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$ και $B \in M_{n,p}(\mathbb{C})$ διαμερίζονται έτσι ώστε οι δύο διαμερίσεις του $\{1, \dots, n\}$ να συμπίπτουν, τότε οι δυο διαμερίσεις πινάκων λέγονται* **σύμμορφες (conformal)**. *Σε αυτή τη περίπτωση,*

$$(AB)[\alpha_i, \gamma_j] = \sum_{k=1}^{s} A[\alpha_i, \beta_k]B[\beta_k, \gamma_j] \tag{1.1}$$

όπου οι αντίστοιχες συλλογές υποπινάκων $A[\alpha_i, \beta_k]$ και $B[\beta_k, \gamma_j]$ είναι σύμμορφες διαμερίσεις των A και B, αντίστοιχα.

Το αριστερό μέρος της (1.1) είναι ένας υποπίνακας του γινομένου AB και κάθε άθροισμα του δεξιού μέρους είναι ένα τυπικό γινόμενο πινάκων.

Παρατήρηση. Ο πολλαπλασιασμός διαμερισμένων πινάκων μιμείται τον συνηθισμένο πολλαπλασιασμό πινάκων.

Παράδειγμα 1.1.2. Οι πίνακες $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 3 & 4 & -3 \\ 6 & 5 & 0 \end{bmatrix}$ και $B = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 7 & 0 \\ 3 & 0 & 4 & 5 \\ -2 & 1 & -3 & 1 \end{bmatrix}$ μπορούν να διαμεριστούν ως εξής

$$\left[\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & -1 \\ 3 & -4 & -3 \\ \hline 6 & 5 & 0 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} A_{11} & A_{12} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array}\right]$$

και

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & -1 & 7 & 0 \\ 3 & 0 & 4 & 5 \\ \hline -2 & 1 & -3 & 1 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} B_{11} & B_{12} \\ \hline B_{21} & B_{22} \end{array}\right].$$

Το γινόμενο AB είναι

$$AB = \left[\begin{array}{c|c} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ \hline A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{array}\right].$$

Ορισμός 1.1.4. *Αν ένας πίνακας διαμερίζεται από διαδοχικές διαμερίσεις των γραμμών και των στηλών του, ο διαμερισμένος πίνακας που προκύπτει ονομάζεται* **πίνακας μπλοκ (block matrix)**.

Παράδειγμα 1.1.3. Έστω ότι οι γραμμές και οι στήλες του $A \in M_n(\mathbb{C})$ διαμερίζονται από την ίδια διαδοχική διαμέριση $\alpha_1 = \{1, \dots, k\}$, $\alpha_2 = \{k+1, \dots, n\}$, ο μπλοκ πίνακας που προκύπτει είναι

$$A = \begin{bmatrix} A[\alpha_1, \alpha_1] & A[\alpha_1, \alpha_2] \\ A[\alpha_2, \alpha_1] & A[\alpha_2, \alpha_2] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$$

όπου τα μπλοκ είναι $A_{ij} = A[\alpha_i, \alpha_j]$.

Σχόλιο. Οι μπλοκ πίνακες 2×2 είναι οι πιο σημαντικοί και χρήσιμοι.

1.1.3 Ο αντίστροφος ενός διαμερισμένου πίνακα

Είναι χρήσιμο να γνωρίζουμε τα αντίστοιχα μπλοκ ενός αντίστροφου διαμερισμένου αντιστρέψιμου πίνακα A, δηλαδή να παρουσιάσουμε τον αντίστροφο ενός διαμερισμένου πίνακα σε σύμμορφη διαμερίσιμη μορφή. Αυτό μπορεί να γίνει με διάφορους φαινομενικά διαφορετικούς, αλλά ισοδύναμους τρόπους, υποθέτοντας ότι ορισμένοι υποπίνακες του $A \in M_n(\mathbb{C})$ και του A^{-1} είναι επίσης αντιστρέψιμοι. Για απλότητα, έστω A ένας 2×2 πίνακας μπλοκ με

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$$

με $A_{ii} \in M_{n_i}(F)$, $i = 1, 2$ και $n_1 + n_2 = n$. Μια χρήσιμη έκφραση για τη διαμέριση του A^{-1} είναι

$$\begin{bmatrix} (A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21})^{-1} & A_{11}^{-1}A_{12}(A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} - A_{22})^{-1} \\ A_{22}^{-1}A_{21}(A_{12}A_{22}^{-1}A_{21} - A_{11})^{-1} & (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1} \end{bmatrix} \tag{1.2}$$

υποθέτοντας ότι υπάρχουν όλοι οι σχετικοί αντίστροφοι. Αυτή η έκφραση για τον A^{-1} μπορεί να επαληθευτεί πολλαπλασιάζοντας με τον διαμερισμένο A και στη συνέχεια απλοποιώντας. Μπορούμε να γράψουμε

$$A^{-1}[\alpha] = (A[\alpha] - A[\alpha, \alpha^c]A[\alpha^c]^{-1}A[\alpha^c, \alpha])^{-1}$$

και

$$\begin{aligned} A^{-1}[\alpha, \alpha^c] = &\ A[\alpha]^{-1}A[\alpha, \alpha^c](A[\alpha^c, \alpha]A[\alpha]^{-1}A[\alpha, \alpha^c] - A[\alpha^c])^{-1} \\ = &\ (A[\alpha, \alpha^c]A[\alpha^c]^{-1}A[\alpha^c, \alpha] - A[\alpha])^{-1}A[\alpha, \alpha^c]A[\alpha^c]^{-1} \end{aligned}$$

και πάλι υποθέτοντας ότι οι σχετικοί αντίστροφοι υπάρχουν.

Παρατήρηση. Ο $A^{-1}[\alpha]$ είναι ένας υποπίνακας του A^{-1}, ενώ ο $A[\alpha]^{-1}$ είναι ο αντίστροφος ενός υποπίνακα του A. Γενικά, οι $A^{-1}[\alpha]$ και $A[\alpha]^{-1}$ δεν είναι ίδιοι.

1.1.4 Μεταθετικοί, αντιμεταθετικοί και διαγώνιοι μπλοκ πίνακες

Ορισμός 1.1.5. *Δύο πίνακες $A, B \in M_n(\mathbb{C})$ λέγεται ότι* **μετατίθενται (commute)** *αν ισχύει ότι $AB = BA$.*

Η μεταθετικότητα δεν ειναι τυπική αλλα είναι ένα σημαντικό παράδειγμα που το συναντάμε συχνά.

Πρόταση 1.1.1. *Υποθέτουμε ότι $\Lambda = [\Lambda_{ij}]_{i,j=1}^{s} \in M_n(\mathbb{C})$ είναι ένας μπλοκ πίνακας όπου $\Lambda_{ij} = 0$ αν $i \neq j$, και $\Lambda_{ii} = \lambda_i I_{n_i}$ για ορισμένα $\lambda_i \in \mathbb{C}$ με $i = 1, \ldots, s$ και $\lambda_i \neq \lambda_j$ αν $i \neq j$. Έστω διαμερίσιμος $B = [B_{ij}]_{i,j=1}^{s} \in M_n(\mathbb{C})$ σύμμορφος με τον Λ. Τότε $\Lambda B = B\Lambda$ αν και μόνο αν $\lambda_i B_{ij} = B_{ij}\lambda_j$ για κάθε $i, j = 1, \ldots, s$, δηλαδή $(\lambda_i - \lambda_j)B_{ij} = 0$ για κάθε $i, j = 1, \ldots, s$. Αυτές οι ταυτότητες ικανοποιούνται αν και μόνο αν $B_{ij} = 0$ όταν $i \neq j$. Άρα, ο Λ μετατίθεται με τον B αν και μόνο αν ο B είναι ένας διαγώνιος μπλοκ σύμμορφος με τον Λ.*

Ορισμός 1.1.6. *Δύο πίνακες $A, B \in M_n(\mathbb{C})$ λέγεται ότι* **αντιμετατίθενται (anticommute)** *αν ισχύει ότι $AB = -BA$.*

Παράδειγμα 1.1.4. Ο $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ και ο $B = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ αντιμετατίθενται.

1.1.5 Η απεικόνιση vec

Ορισμός 1.1.7. *Έστω $A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$. Μία διαμέριση του πίνακα A σύμφωνα με τις στήλες του $A = [\alpha_1 \dots \alpha_n]$, ορίζεται η απεικόνιση vec: $M_{m,n}(\mathbb{C}) \to \mathbb{C}^{mn}$*

$$vec\ A = [\alpha_1^T \dots \alpha_n^T]^T.$$

Δηλαδή, vec A ονομάζουμε ένα διάνυσμα που προκύπτει από την στοίχιση τών στηλών του πίνακα A, από αριστερά προς τα δεξιά.

Σχόλιο. Ο τελεστής *vec* είναι ένα χρήσιμο εργαλείο σε προβλήματα που αφορούν εξισώσεις πινάκων.

1.2 Ειδικοί Τύποι Πινάκων

1.2.1 Διαγώνιοι πίνακες

Ορισμός 1.2.1. *Ένας πίνακας $D = [d_{ij}] \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ ονομάζεται* **διαγώνιος (diagonal)** *αν $d_{ij} = 0$ για $i \neq j$. Αν όλα τα διαγώνια στοιχεία ενός διαγώνιου πίνακα είναι θετικοί (μη αρνητικοί) πραγματικοί αριθμοί, τότε τον ονομάζουμε* **θετικό (μη αρνητικό) διαγώνιο πίνακα (positive (nonnegative) diagonal matrix)**.

Ο όρος *θετικός διαγώνιος πίνακας* σημαίνει ότι ο πίνακας είναι διαγώνιος και έχει θετικα διαγώνια στοιχεία, δεν αναφέρεται σε γενικό πίνακα με θετικα διαγώνια στοιχεία.

Παράδειγμα 1.2.1. Ο ταυτοτικός πίνακας $I \in M_n(\mathbb{C})$ είναι θετικός διαγώνιος πίνακας.

Ορισμός 1.2.2. *Ένας τετραγωνικός διαγώνιος πίνακας D ονομάζεται* **βαθμωτός πίνακας (scalar matrix)** *αν τα διαγώνια στοιχεία του είναι όλα ίσα, δηλαδή $D = \alpha I$ για κάποιο $\alpha \in \mathbb{C}$.*

Παρατήρηση. Ο αριστερος ή ο δεξιός πολλαπλασιασμός ενός πίνακα με έναν βαθμωτό πίνακα έχει το ίδιο αποτέλεσμα με τον πολλαπλασιαμό του πίνακα με το αντίστοιχο βαθμωτό.

Πρόταση 1.2.1. *Αν $A = [\alpha_{ij}] \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ και $q = \min\{m,n\}$, τότε* diag $A = [\alpha_{11}, \dots, \alpha_{qq}]^T \in \mathbb{C}^q$ δηλώνει το διάνυσμα των διαγώνιων στοιχείων του A. Αντίστροφα, αν $x \in \mathbb{C}^q$ και αν m, n είναι θετικοί ακέραιοι τέτοιοι ώστε $\min\{m,n\} = q$, τότε το $x \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ δηλώνει την ύπαρξη $n \times m$ διαγώνιου πίνακα A τέτοιου ώστε diag $A = x$, με diag x καλά ορισμένο, m και n δοσμένα. Για οποιαδήποτε $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{C}$, το $\mathrm{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ δηλώνει πάντα τον πίνακα $A = [\alpha_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$ τέτοιο ώστε $\alpha_{ii} = \alpha_i$ για κάθε $i = 1, \dots, n$ και $\alpha_{ij} = 0$ αν $i \neq j$.

Πρόταση 1.2.2. *Ας υποθέσουμε ότι $D = [d_{ij}]$, $E = [e_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$ είναι διαγώνιοι και έστω δοσμένο $A = [\alpha_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$. Τότε ισχύουν τα παρακάτω:*

1. $\det D = \prod_{i=1}^n d_{ii}$

2. *Ο D είναι αντιστρέψιμος αν και μόνο αν όλα τα $d_{ii} \neq 0$*

3. *Ο αριστερός πολλαπλασιασμός του A με τον D πολλαπλασιάζει τις γραμμές του A με τα διαγώνια στοιχεία του D, δηλαδή η i γραμμή του DA είναι d_{ii} φορές την i γραμμή του A*

4. *Ο δεξιός πολλαπλασιασμός του A με τα διαγώνια στοιχεία του D πολλαπλασιάζει τις στήλες του A με τα διαγώνια στοιχεία του D, δηλαδή η j στήλη του AD είναι d_{jj} φορές την j στήλη του A*

5. *$DA = AD$ αν και μόνο αν $\alpha_{ij} = 0$ για οποιοδήποτε $d_{ii} \neq d_{jj}$*

6. *Αν όλα τα διαγώνια στοιχεία του D είναι διακριτά και $DA = AD$, τότε ο A είναι διαγώνιος.*

7. *$D^k = \mathrm{diag}\ (d_{11}^k, \ldots, d_{nn}^k)$, για κάθε θετικό ακέραιο k και*

8. *Δύο τυχαίοι διαγώνιοι πίνακες D και E με ίδιο μέγεθος μετατίθενται: $DE = \mathrm{diag}\ (d_{11}e_{11}, \ldots, d_{nn}e_{nn}) = ED$.*

1.2.2 Διαγώνιοι μπλοκ πίνακες και ευθύ άθροισμα

Ορισμός 1.2.3. *Ένας πίνακας $A \in M_n(\mathbb{C})$ της μορφής*

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & A_{kk} \end{bmatrix}$$

όπου $A_{ii} \in M_{n_i}(\mathbb{C})$, $i = 1, \ldots, k$, $\sum_{i=1}^{k} n_i = n$, και όλα τα μπλοκ πάνω και κάτω από τα διαγώνια μπλοκ είναι μηδενικά, τότε ο A ονομάζεται **διαγώνιος μπλοκ (block diagonal)**. *Ένας τέτοιος πίνακας γράφεται και ως*

$$A = A_{11} \oplus A_{22} \oplus \cdots \oplus A_{kk} = \bigoplus_{i=1}^{k} A_{ii},$$

το οποίο καλείται **ευθύ άθροισμα (direct sum)** *των πινάκων $A_{11}, \ldots, A_{kk}$.*

Σχόλιο. Πολλές ιδιότητες των διαγώνιων μπλοκ πινάκων γενικεύουν αυτές των διαγώνιων πινάκων.

Παράδειγμα 1.2.2. $\det(\oplus_{i=1}^{k} A_{ii}) = \prod_{i=1}^{k} det A_{ii}$, έτσι ώστε ο $A = \oplus A_{ii}$ να είναι αντιστρέψιμος αν και μόνο αν κάθε A_{ii} είναι αντιστρέψιμος, $i = 1, \ldots, k$. Επιπλέον, δύο ευθεία αθροίσματα $A = \oplus_{i=1}^{k} A_{ii}$ και $B = \oplus_{i=1}^{k} B_{ii}$, στα οποία κάθε A_{ii} έχει το ίδιο μέγεθος με το B_{ii}, μετατίθεται εάν και μόνο εάν κάθε ζεύγος A_{ii} και B_{ii} μετατίθεται, για $i = 1, \ldots, k$. Επίσης, $\mathrm{rank}(\oplus_{i=1}^{k} A_{ii}) = \sum_{i=1}^{k} \mathrm{rank}\ A_{ii}$.

1.2.3 Τριγωνικοί πίνακες

Ορισμός 1.2.4. *Ένας πίνακας $T = [t_{ij}] \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ ονομάζεται* **άνω τριγωνικός (upper triangular)** *αν $t_{ij} = 0$ όταν $i > j$. Αν $t_{ij} = 0$, $i \geq j$ τότε ο T λέγεται αυστηρά (strictly) άνω τριγώνικος.*

Ορισμός 1.2.5. *Ο T ονομάζεται* **κάτω τριγωνικός (lower triangular)** *(ή αυστηρά κάτω τριγωνικός) αν ο ανάστροφος του είναι άνω τριγωνικός (ή αυστηρά άνω τριγωνικός).*

Παρατήρηση. Ένας τριγωνικός πίνακας είναι άνω ή κάτω τριγωνικός, αντίστοιχα ένας αυστηρά τριγωνικός πίνακας είναι αυστηρά άνω τριγωνικός ή αυστηρά κάτω τριγωνικός πίνακας.

Ορισμός 1.2.6. Μοναδιαίος τριγωνικός πίνακας (unit triangular matrix) *ονομάζεται ένας τριγωνικός πίνακας (άνω ή κάτω) όπου όλα τα στοιχεία στην κύρια διαγώνιο είναι ίσα με ένα.*

Σχόλιο. Μερικές φορές, για να περιγράψουμε έναν άνω ή κάτω τριγωνικό πίνακα χρησιμοποιούμε τους όρους δεξιός ή αριστερός τριγωνικός πίνακας, αντίστοιχα.

Παρατήρηση. Έστω $T \in M_{n,m}(\mathbb{C})$. Αν ο T είναι άνω τριγωνικός, τότε έχουμε τις εξής περιπτώσεις:

(i) αν $n \leq m$
$$T = \begin{bmatrix} R & T_2 \end{bmatrix},$$

(ii) αν $n \leq m$
$$T = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix},$$

(iii) αν $n = m$
$$T = [R]$$

όπου $R \in M_{\min\{n,m\}}(\mathbb{C})$ είναι ένας άνω τριγωνικός πίνακας και T_2 αυθαίρετος.

Παρατήρηση. Έστω $T \in M_{n,m}(\mathbb{C})$. Αν T είναι ένας κάτω τριγωνικός πίνακας, τότε

(i) αν $n \geq m$
$$T = \begin{bmatrix} L & 0 \end{bmatrix},$$

(ii) αν $n \leq m$
$$T = \begin{bmatrix} L \\ T_2 \end{bmatrix},$$

(iii) αν $n = m$
$$T = [R]$$

όπου $L \in M_{\min\{n,m\}}(\mathbb{C})$ είναι ένας κάτω τριγωνικός πίνακας και T_2 αυθαίρετος.

Παρατήρηση. Η ορίζουσα ενός τετραγωνικού τριγωνικού πίνακα ισούται με το γινόμετο των διαγώνιων στοιχείων του, όπως ισχύει και στους τετραγωνικούς διαγώνιους πίνακες.

Σχόλιο. Οι τετραγωνικοί τριγωνικοί πίνακες δεν μετατίθενται απαραίτητα με άλλους τετραγωνικούς πίνακες ίδιου μεγέθους. Ωστόσο, αν $T \in M_n(\mathbb{C})$ είναι τριγωνικός, έχει διακριτά διαγώνια στοιχεία, και μετατίθεται με τον $B \in M_n(\mathbb{C})$, τότε ο B πρέπει να είναι τριγωνικός ίδιου τύπο με τον T.

Παρατήρηση. Για κάθε $i = 1, \ldots, n$, ο αριστερός πολλαπλασιασμός του $A \in M_n(\mathbb{C})$ με έναν κάτω τριγωνικό πίνακα $L\,(A \to LA)$ αντικαθιστά την i γραμμή του A με τον γραμμικό συνδυασμό των στοιχείων της i γραμμής του L και των i γραμμών του A. Μπορούν να γίνουν αντίστοιχες δηλώσεις σχετικά με τις πράξεις στηλών και τον δεξιό πολλαπλασιασμό με έναν άνω τριγωνικό πίνακα. Δηλαδή ο δεξιός πολλαπλασιασμός του A με έναν άνω τριγωνικό πίνακα $L\,(A \to AL)$ αντικαθιστά την j στήλη του A με τον γραμμικό συνδιασμό των στοιχείων της j στήλης του L και των j στηλών του A.

Παρατήρηση. Η τάξη ενός τριγωνικού πίνακα είναι μεγαλύτερη ή ίση από τον αριθμό των μη μηδενικών στοιχείων της κύριας διαγωνίου.

Παρατήρηση. Αν ένας τετραγωνικός τριγωνικός πίνακας είναι αντιστρέψιμος, τότε ο αντίστροφος του είναι ένας τριγωνικός πίνακας ίδιου τύπου.

Παρατήρηση. Ένα γινόμενο τετραγωνικών τριγωνικών πινάκων του ίδιου μεγέθους και τύπου είναι ένας τριγωνικός πίνακας του ίδιου τύπου, όπου τα στοιχεία της διαγωνίου του είναι το γινόμενο των διαγώνιων στοιχείων των αρχικών πινάκων.

1.2.4 Μπλοκ τριγωνικοί πίνακες

Ορισμός 1.2.7. *Ένας πίνακας $A \in M_n(\mathbb{C})$ της μορφής*

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & \bigstar & \bigstar \\ & \ddots & \bigstar \\ \mathbf{0} & & A_{kk} \end{bmatrix} \tag{1.3}$$

όπου $A_{ii} \in M_{n_i}(\mathbb{C})$, $i = 1, \ldots, n$, $\sum_{i=1}^{k} n_i = n$, και όλα τα μπλοκ κάτω από τα διαγώνια μπλοκ είναι μηδέν, τότε ονομάζεται **άνω τριγωνικός μπλοκ (block upper triangular)**. *Επιπλέον, αν όλα τα διαγώνια μπλοκ είναι μηδέν τότε ονομάζεται* **αυστηρά (strictly) άνω τριγωνικός μπλοκ**.

Ορισμός 1.2.8. *Ένας πίνακας ονομάζεται* **κάτω τριγωνικός μπλοκ (block lower triangular)** *όταν ο ανάστροφος του είναι άνω τριγωνικός μπλοκ. Επιπλέον, αν ο ανάστροφος του είναι αυστηρά άνω τριγωνικός μπλοκ, τότε ο πίνακας ονομάζεται* **αυστηρά (strictly) κάτω τριγωνικός μπλοκ**.

Ορισμός 1.2.9. *Ένας πίνακας ονομάζεται* **τριγωνικός μπλοκ (block triangular)** *αν είναι άνω ή κάτω τριγωνικός μπλοκ.*

Πρόταση 1.2.3. *Ένας πίνακας είναι άνω και κάτω τριγωνικός μπλοκ αν και μόνο αν είναι διαγώνιος μπλοκ.*

Ορισμός 1.2.10. *Ένας άνω τριγωνικός μπλοκ στο οποίο τα διαγώνια μπλοκ είναι 1×1 ή 2×2 ονομάζεται* **άνω σχεδόν τριγωνικός (upper quasitriangular)**.

Ορισμός 1.2.11. *Ένας κάτω τριγωνικός μπλοκ ονομάζεται* **κάτω σχεδόν τριγωνικός (lower quasitriangular)** *αν ο ανάστροφος του είναι άνω σχεδόν τριγωνικός.*

Ορισμός 1.2.12. *Ένας τριγωνικός μπλοκ ονομάζεται* **σχεδόν τριγωνικός μπλοκ (quasitriangular)** *αν είναι άνω ή κάτω σχεδόν τριγωνικός.*

Ορισμός 1.2.13. *Ένας πίνακας ονομάζεται* **σχεδόν διαγώνιος (quasidiagonal)** *αν είναι άνω και κάτω σχεδόν τριγωνικός.*

Παρατήρηση. Θεωρούμε τον τετραγωνικό μπλοκ πίνακα A (1.3). Έχουμε ότι

$$\det A = \det A_{11} \cdots \det A_{kk}$$

και

$$\operatorname{rank} A \geq \operatorname{rank} A_{11} + \cdots + \operatorname{rank} A_{kk}.$$

Αν ο A είναι αντιστρέψιμος (δηλαδή, αν ο A_{ii} είναι αντιστρέψιμος για όλα τα $i = 1, \ldots, k$), τότε ο A^{-1} είναι ένας τριγωνικός μπλοκ πίνακας, σύμμορφος με τον A του οποίου τα διαγώνια μπλοκ είναι $A_{11}^{-1}, \ldots, A_{kk}^{-1}$.

Αν $A \in M_n(\mathbb{C})$ είναι άνω τριγωνικός, τότε $[A[\alpha_i, \alpha_j]]_{i,j=1}^{t}$ είναι άνω τριγωνικός μπλοκ για κάθε διαδοχική διαμέριση $\alpha_1, \ldots, \alpha_t$ του $\{1, \ldots, n\}$.

1.2.5 Πίνακες μετάθεσης

Ορισμός 1.2.14. *Ένας τετραγωνικός πίνακας P ονομάζεται* **πίνακας μετάθεσης (permutation matrix)** *αν άκριβως ένα στοιχείο του σε κάθε γραμμή και στήλη ισούται με 1 και όλα τα άλλα στοιχεία είναι 0.*

Σχόλιο. Ο πολλαπλασιασμός ενός τυχαίου πίνακα με έναν πίνακα μετάθεσης επηρεάζει τη μετάθεση γραμμών ή στηλών του τυχαίου πίνακα.

Στο επόμενο παράδειγμα επεξηγούμε πως ένας πίνακας μετάθεσης παράγει μία μετάθεση των γραμμών (στοιχείων) ενός διανύσματος.

Παράδειγμα 1.2.3. Για

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

έχουμε

$$P \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

δηλαδή στέλνει το πρώτο στοιχείο στη δεύτερη θέση, το δεύτερο στοιχείο στη πρώτη θέση και αφήνει το τρίτο στοιχείο στην τρίτη θέση.

Παρατήρηση. Ο αριστερός πολλαπλασιασμός ένος πίνακα $A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$ με έναν $m \times m$ πίνακα μετάθεσης P μεταθέτει τις γραμμές του A, ενώ ο δεξιός πολλαπλασιασμός του A με έναν $n \times n$ πίνακα μετάθεσης P μεταθέτει τις στήλες του A.

Παρατήρηση. Η ορίζουσα ενός μεταθετικού πίνακα ειναι ± 1, επομένως οι πίνακες μετάθεσης είναι αντιστρέψιμοι.

Παρατήρηση. Αν και οι πίνακες μετάθεσης δε χρειάζεται να μετατίθενται, το γινόμενο δύο πινάκων μετάθεσης είναι και αυτός πίνακας μετάθεσης.

Παρατήρηση. Αν $\Lambda \in M_n(\mathbb{C})$ είναι διαγώνιος και $P \in M_n(\mathbb{C})$ είναι ένας πίνακας μετάθεσης, τότε $P\Lambda P^T$ είναι ένας διαγώνιος πίνακας.

Ορισμός 1.2.15. *Ορίζουμε ως* **πίνακα αντιστροφής (reversal matrix)** *τον* $n \times n$ *πίνακα μετάθεσης της μορφής*

$$K_n = \begin{bmatrix} & & 1 \\ & \iddots & \\ 1 & & \end{bmatrix} = [\kappa_{ij}] \in M_n(\mathbb{C}), \tag{1.4}$$

όπου $\kappa_{i,n-i+1} = 1$ *για* $i = 1, \ldots, n$ *και όλα τα άλλα στοιχεία είναι 0.*

Σχόλιο. Οι γραμμές του $K_n A$ είναι οι γραμμές του A που παριστάνονται με αντίστροφη σειρά. Οι στήλες του AK_n είναι οι στήλες του A που παριστάνονται με αντίστροφη σειρά.

1.2.6 Hessenberg Πίνακες

Ορισμός 1.2.16. *Ένας πίνακας* $H = [\alpha_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$ *ονομάζεται* **άνω Hessenberg πίνακας (upper Hessenberg matrix)** *αν* $h_{ij} = 0$ *για όλα τα* $i > j + 1$*:*

$$H = \begin{bmatrix} h_{11} & & & & \bigstar \\ h_{21} & h_{22} & & & \\ & h_{32} & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & h_{n,n-1} & h_{n,n} \end{bmatrix}$$

Ένας άνω Hessenberg πίνακας H λέγεται **unreduced** *ή* **irreducible** *αν όλα τα υποδιαγώνια στοιχεία του είναι μη μηδενικά, δηλαδή, αν* $h_{i+1,i} \neq 0$ *για κάθε* $i = 1, \ldots, n-1$*, η τάξη ενός τέτοιου πίνακα είναι το λιγότερο* $n-1$ *αφού οι πρώτες* $n-1$ *στήλες του είναι ανεξάρτητες.*

Έστω $H \in M_n(\mathbb{C})(F)$ *ένας unreduced άνω Hessenberg πίνακας. Τότε ο* $H - \lambda I$ *είναι unreduced άνω Hessenberg πίνακας για κάθε* $\lambda \in \mathbb{C}$*, άρα* rank$(H - \lambda I) \geq n - 1$ *για κάθε* $\lambda \in \mathbb{C}$.

Ένας πίνακας $H \in M_n(\mathbb{C})$ *είναι* **κάτω Hessenberg (lower Hessenberg)** *αν ο* H^T *είναι άνω Hessenberg πίνακας.*

1.2.7 Τριδιαγώνιοι Πίνακες

Ορισμός 1.2.17. *Ένας πίνακας* $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$ *ο οποίος είναι ταυτόχρονα άνω και κάτω Hessenberg ονομάζεται* **τριδιαγώνιος (tridiagonal)***, δηλαδή ο A είναι τριδιαγώνιος αν* $a_{ij} = 0$ *όταν* $|i - j| > 1$:

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & 0 \\ c_1 & a_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & c_{n-1} & a_n \end{bmatrix}. \tag{1.5}$$

Σχόλιο. Ένας **τριδιαγώνιος μπλοκ πίνακας (block tridiagonal matrix)** έχει δομή μπλοκ όπως στην (1.5). Τα διαγώνια μπλοκ είναι τετραγωνικά και τα μεγέθη των άνω και κάτω από την διαγώνιο μπλοκ καθορίζονται από τα μεγέθη των πλησιέστερων διαγώνιων μπλοκ.

Κεφάλαιο 2

Ιδιοτιμές, Ιδιοδιανύσματα και Ομοιότητα

2.1 Η Εξίσωση Ιδιοτιμών-Ιδιοδιανυσμάτων

Ορισμός 2.1.1. *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$. Αν ένα βαθμωτό λ και ένα μη μηδενικό διάνυσμα x ικανοποιούν την εξίσωση*

$$Ax = \lambda x, \qquad x \in \mathbb{C}^n,\ x \neq 0,\ \lambda \in \mathbb{C}, \tag{2.1}$$

τότε το λ ονομάζεται **ιδιοτιμή (eigenvalue)** *του A και το x ονομάζεται* **ιδιοδιάνυσμα (eigenvector)** *του A που αντιστοιχεί στο λ.*

Ορισμός 2.1.2. **Φάσμα (spectrum)** *του $A \in M_n(\mathbb{C})$ ονομάζεται το σύνολο όλων των $\lambda \in \mathbb{C}$ που είναι ιδιοτιμές του A. Συμβολίζουμε το σύνολο αυτό ως $\sigma(A)$.*

Θεώρημα 2.1.1. *Έστω $p(t)$ ένα δοσμένο πολυώνυμο βαθμου k. Αν λ, x είναι ένα ζεύγος ιδιοτιμής - ιδιοδιανύσματος του $A \in M_n(\mathbb{C})$, τότε το $p(\lambda), x$ είναι το ζεύγος ιδιοτιμής - ιδιοδιανύσματος του $p(A)$. Αντίθετα, αν $k \geq 1$ και αν μ είναι ιδιοτιμή του $p(A)$, τότε υπάρχει κάποια ιδιοτιμή λ του A τέτοια ώστε $\mu = p(\lambda)$.*

Απόδειξη. Έχουμε

$$p(A)x = a_k A^k x + a_{k-1}A^{k-1}x + \cdots + a_1 Ax + a_0 x, \quad a_k \neq 0$$

και

$$A^j x = A^{j-1}Ax = A^{j-1}\lambda x = \lambda A^{j-1}x = \ldots = \lambda^j x$$

με επανειλημμένη εφαρμογή της εξίσωσης ιδιωτιμών - ιδιοδιανυσμάτων. Έτσι,

$$p(A)x = a_k\lambda^k x + \ldots + a_0 x = (a_k\lambda^k + \ldots + a_0)x = p(\lambda)x.$$

Αντίστροφα, αν μ είναι μία ιδιοτιμή του $p(A)$, τότε $p(A) - \mu I$ είναι μη αντιστρέψιμος. Καθώς το πολυώνυμο $p(t)$ έχει βαθμό $k \geq 1$, το πολυώνυμο $q(t) = p(t) - \mu$ έχει βαθμό $k \geq 1$ και μπορούμε να το παραγοντοποιήσουμε ως εξής $q(t) = (t - \beta_1)\ldots(t - \beta_k)$ για κάποιους μιγαδικούς ή πραγματικούς αριθμούς $\beta_1, \ldots \beta_k$. Καθώς $p(A) - \mu I = q(A) = (A - \beta_1 I)\cdots(A - \beta_k I)$ είναι μη αντιστρέψιμος, κάποιοι παράγοντες $A - \beta_j I$ είναι μη αντιστρέψιμοι, το οποίο σημαίνει ότι τα β_j είναι ιδιοτιμές του A. Όμως, $0 = q(\beta_j) = p(\beta_j) - \mu$, άρα $\mu = p(\beta_j)$. □

Παρατήρηση. Ένας πίνακας $A \in M_n(\mathbb{C})$ είναι μη αντιστρέψιμος αν και μόνο αν $0 \in \sigma(A)$.

Απόδειξη. Ο πίνακας Α είναι μη αντιστρέψιμος αν και μόνο αν $Ax = 0$ για κάποιο $x \neq 0$. Αυτό συμβαίνει αν και μόνο αν $Ax = 0x$ για κάποιο $x \neq 0$, δηλαδή, αν και μόνο αν $\lambda = 0$ είναι ιδιοτιμή του Α. □

Παρατήρηση. Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$ και $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$. Τότε $\lambda \in \sigma(A)$ αν και μόνο αν $\lambda + \mu \in \sigma(A + \mu I)$.

Απόδειξη. Αν $\lambda \in \sigma(A)$, τότε υπάρχει ένα μη μηδενικό διάνυσμα x τέτοιο ώστε $Ax = \lambda x$ και άρα $(A+\mu I)x = Ax+\mu x = \lambda x+\mu x = (\lambda+\mu)x$. Επομένως, $\lambda+\mu \in \sigma(A+\mu I)$.

Αντίστροφα, αν $\lambda + \mu \in \sigma(A + \mu I)$, υπάρχει ένα μη μηδενικό διάνυσμα y τέτοιο ώστε $Ay + \mu y = (A + \mu I)y = (\lambda + \mu)y = \lambda y + \mu y$. Άρα, $Ay = \lambda y$ και $\lambda \in \sigma(A)$. □

Παρατήρηση. Κάθε μιγαδικός πίνακας έχει ένα μη κενό φάσμα, δηλαδή, για κάθε $A \in M_n(\mathbb{C})$ υπάρχει κάποιο βαθμωτό $\lambda \in \mathbb{C}$ και κάποιο μη μηδενικό $x \in \mathbb{C}^n$ τέτοιο ώστε $Ax = \lambda x$.

Θεώρημα 2.1.2. *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$. Τότε ο A έχει ιδιοτιμή. Πράγματι, για κάθε δεδομένο μη μηδενικό $y \in C_n$ υπάρχει ένα πολυώνυμο $g(t)$ βαθμού το πολύ $n-1$ τέτοιο ώστε, το $g(A)y$ να είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του A.*

Απόδειξη. Έστω m ο μικρότερος ακέραιος k τέτοιος ώστε τα διανύσματα $y, Ay, A^2y, \ldots, A^ky$ να είναι γραμμικώς εξαρτημένα. Τότε $m \geq 1$ αφού $y \neq 0$, και $m \leq n$ αφού οποιαδήποτε $n+1$ διανύσματα στο $\mathbb{C}^n$ είναι γραμμικώς εξαρτημένα. Έστω $\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_m$ βαθμωτά, όχι όλα μηδενικά, τέτοια ώστε

$$\alpha_m A^m y + \alpha_{m-1} A^{m-1} y + \ldots + \alpha_1 A y + \alpha_0 y = 0 \tag{2.2}$$

Αν $\alpha_m = 0$, τότε η (2.2) δηλώνει ότι τα διανύσματα $y, Ay, A^2y, \ldots, A^{m-1}y$ είναι γραμμικώς εξαρτημένα, που έρχεται σε αντίθεση με την αρχική υπόθεση για τον m . Έτσι, $\alpha_m \neq 0$, και μπορούμε να θεωρήσουμε το πολυώνυμο $p(t) = t^m+(\alpha_{m-1}/\alpha_m)t^{m-1}+ \ldots + (\alpha_1/\alpha_m)t + (\alpha_0/\alpha_m)$. Η σχέση (2.2) διασφαλίζει ότι $p(A)y = 0$, οπότε $0, y$ είναι ένα ζεύγος ιδιοτιμών - ιδιοδιανυσμάτων για το $p(A)$. Από το θεώρημα (2.1.1) έχουμε ότι ένα από τα m μηδενικά στοιχεία του $p(t)$ είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του Α.

Υποθέτουμε ότι το λ είναι μία ρίζα του $p(t)$ η οποία είναι ιδιοτίμη του A και παράγοντας του $p(t) = (t - \lambda)g(t)$, όπου το $g(t)$ είναι ένα πολυώνυμο $m - 1$ βαθμού. Αν $g(A)y = 0$ καταλήγουμε σε αντίθεση, πάλι από την αρχική υπόθεση για το m, οπότε $g(A)y \neq 0$. Αλλά $0 = p(A)y = (A - \lambda I)(g(A)y)$, οπότε το μη μηδενικό διάνυσμα $g(A)y$ είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του Α που συνδέεται με την ιδιοτιμή λ. □

2.2 Χαρακτηριστικό Πολυώνυμο και Αλγεβρική Πολλαπλότητα

Γράφουμε πάλι την εξίσωση ιδιοτιμών-ιδιοδιανυσμάτων (2.1) ως εξής

$$(\lambda I - A)x = 0, \qquad x \neq 0. \tag{2.3}$$

Έτσι, $\lambda \in \sigma(A)$ αν και μόνο αν $\lambda I - A$ είναι μη αντιστρέψιμος, δηλαδή, αν και μόνο αν

$$\det(\lambda I - A) = 0 \tag{2.4}$$

Ορισμός 2.2.1. *Θεωρείται ως τυπικό πολυώνυμο στο t, το* **χαρακτηριστικό πολυώνυμο (characteristic polynomial)** *του $A \in M_n(\mathbb{C})$ που ορίζεται ως*

$$p_A(t) = \det(tI - A).$$

Η εξίσωση $p_A(t) = 0$ είναι η **χαρακτηριστική εξίσωση (characteristic equation)** *του A.*

Παρατήρηση. Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο για κάθε $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$ έχει βαθμό n και $p_A(t) = t^n - (\mathrm{tr}A)t^{n-1} + \cdots + (-1)^n \det A$. Επιπλέον, $p_A(\lambda) = 0$ αν και μόνο αν $\lambda \in \sigma(A)$, άρα το $\sigma(A)$ περιέχει το πολύ n μιγαδικούς αριθμούς.

Ορισμός 2.2.2. *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$. Η* **πολλαπλότητα (multiplicity)** *μιας ιδιοτιμής λ του A ονομάζεται η πολλαπλότητά της ως ρίζα του χαρακτηριστικού πολυωνύμου $p_A(t)$. Για λόγους σαφήνειας, μερικές φορές αναφερόμαστε στη πολλαπλότητα μιας ιδιοτιμής ως η αλγεβρική της πολλαπλότητα.*

Σημείωση. Όταν αναφερόμαστε στις ιδιοτιμές ενός πίνακα $A \in M_n(\mathbb{C})$ εννοούμε πάντα τις ιδιοτιμές μαζί με τις αντίστοιχες (αλγεβρικές) πολλαπλότητές τους. Έτσι, οι ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου του A (συμπεριλαμβανομένων των πολλαπλοτήτων τους) είναι ίδιες με τις ιδιοτιμές του A (συμπεριλαμβανομένων των πολλαπλοτήτων τους):

$$p_A(t) = (t - \lambda_1)(t - \lambda_2)\cdots(t - \lambda_n) \tag{2.5}$$

όπου $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ είναι οι n ιδιοτιμές του A, που παρατίθενται με οποιαδήποτε σειρά. Όταν αναφερόμαστε στις διακριτές ιδιοτιμές του A, εννοούμε τα στοιχεία του συνόλου $\sigma(A)$.

Σημείωση. Κάθε πίνακας $A \in M_n(\mathbb{C})$ έχει ακριβώς n ιδιοτιμές μεταξύ των μιγαδικών αριθμών. Το ίχνος και η ορίζουσα του A είναι το άθροισμα και το γινόμενο, αντίστοιχα, των ιδιοτιμών του. Εάν το A είναι πραγματικό, μερικές ή όλες οι ιδιοτιμές του μπορεί να μην είναι πραγματικές.

Ορισμός 2.2.3. *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$. Η* **φασματική ακτίνα (spectral radius)** *του A είναι $\rho(A) = \{\max|\lambda| : \lambda \in \sigma(A)\}$.*

Παράδειγμα 2.2.1. Έστω ο πίνακας $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$. Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του A είναι

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ -1 & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + 1.$$

- Οι ιδιοτιμές είναι $\lambda_{1,2} = \pm i$,
- το φάσμα είναι $\sigma(A) = \{i, -i\}$,
- η φασματική ακτίνα είναι $\rho(A) = 1$,
- οι ιδιοτιμές έχουν αλγεβρική πολλαπλότητα 1 και
- το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή i είναι $\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}$ και το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $-i$ είναι $\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}$.

Παράδειγμα 2.2.2. Έστω $A = \begin{bmatrix} i & 2 \\ 0 & -i \end{bmatrix}$. Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του A είναι

$$\begin{vmatrix} \lambda - i & -2 \\ 0 & \lambda + i \end{vmatrix} = (\lambda - i)(\lambda + i).$$

- Οι ιδιοτιμές είναι $\lambda_{1,2} = \pm i$,
- το φάσμα είναι $\sigma(A) = \{i, -i\}$,
- η φασματική ακτίνα είναι $\rho(A) = 1$,
- οι ιδιοτιμές έχουν αλγεβρική πολλαπλότητα 1 και
- το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή i είναι $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ και το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $-i$ είναι $\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}$.

2.3 Ομοιότητα

Ορισμός 2.3.1. *Έστω $A, B \in M_n(\mathbb{C})$. Οι πίνακες A, B ονομάζονται* **όμοιοι (similar)** *αν υπάρχει ένας αντιστρέψιμος πίνακας $S \in M_n(\mathbb{C})$ τέτοιος ώστε*

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

Ο μετασχηματισμός $A \to S^{-1}AS$ ονομάζεται **μετασχηματισμός ομοιότητας (similarity transformation)** *και ο S* **πίνακας ομοιότητας (similarity matrix)**. *Λέμε ότι ο B έχει* **όμοια μετάθεση (permutation similar)** *με τον A αν υπάρχει πίνακας μετάθεσης P τέτοιος ώστε $B = P^T AP$. Η έκφραση ¨ο B είναι όμοιος με τον A¨ μερικές φορές γράφεται ως $B \sim A$.*

Θεώρημα 2.3.1. *Έστω $A, B \in M_n(\mathbb{R})$. Αν ο B είναι όμοιος με τον A, τότε ο A και ο B έχουν το ίδιο χαρακτηριστικό πολυώνυμο.*

Απόδειξη. Υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} p_B(t) &= \det(tI - B) \\ &= \det(tS^{-1}S - S^{-1}AS) = \det(S^{-1}(tI - A)S) \\ &= \det S^{-1} \det(tI - A) \det S = (\det S)^{-1}(\det S) \det(tI - A) \\ &= \det(tI - A) = p_A(t) \end{aligned}$$

□

Πόρισμα 2.3.1. *Έστω $A, B \in M_n(\mathbb{C})$ και υποθέτουμε ότι ο A είναι όμοιος με τον B. Τότε:*

(i) οι A και B έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές

(ii) αν ο B είναι διαγώνιος πίνακας, τότε τα κύρια διαγώνια στοιχεία του είναι οι ιδιοτιμές του A

(iii) $B = 0$ (ένας διαγώνιος πίνακας) αν και μόνο αν $A = 0$

(iv) $B = I$ (ένας διαγώνιος πίνακας) αν και μονο αν $A = I$.

Ορισμός 2.3.2. *Εάν ο $A \in M_n$ είναι όμοιος με έναν διαγώνιο πίνακα, τότε ο A ονομάζεται* **διαγωνιοποιήσιμος (diagonalizable)**.

Θεώρημα 2.3.2. *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$. Τότε ο A είναι όμοιος με έναν μπλοκ πίνακα της μορφής*

$$\begin{bmatrix} \Lambda & C \\ 0 & D \end{bmatrix}, \quad \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k),\ D \in M_{n-k},\ 1 \le k < n \tag{2.6}$$

αν και μόνο αν υπάρχουν k γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα στο $\mathbb{C}^n$, καθένα από τα οποία είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του A. Ο πίνακας A είναι διαγωνιοποιήσιμος αν και μόνο αν υπάρχουν n γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα, καθένα από τα οποία είναι ιδιοδιανύσματα του A. Αν $x^{(1)}, \dots, x^{(n)}$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα του A και αν $S = [x^{(1)} \dots x^{(n)}]$, τότε ο $S^{-1}AS$ είναι διαγώνιος πίνακας. Αν ο A είναι όμοιος με έναν πίνακα της μορφής (2.6), τότε τα διαγώνια στοιχεία του Λ είναι ιδιοτιμές του A, και αν το A είναι όμοιος με έναν διαγώνιο πίνακα Λ, τότε τα διαγώνια στοιχεία του Λ είναι όλα οι ιδιοτιμές του A.

Απόδειξη. Έστω ότι $k \le n$, τα n-διανύσματα $x^{(1)}, \dots, x^{(k)}$ είναι γραμμικώς ανεξάρτητα και $Ax^{(i)} = \lambda_i x^{(i)}$ για κάθε $i = 1, \dots, k$. Έστω $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$, και $S_1 = [x^{(1)}, \dots, x^{(k)}]$, $S_2 \in M_n(\mathbb{C})$ τέτοια ώστε ο πίνακας $S = \begin{bmatrix} S_1 & S_2 \end{bmatrix}$ είναι αντιστρέψιμος. Υπολογίζουμε:

$$\begin{aligned} S^{-1}AS &= S^{-1}[Ax^{(1)} \dots Ax^{(k)} AS_2] \\ &= S^{-1}[\lambda_1 x^{(1)} \dots \lambda_k x^{(k)} AS_2] \\ &= [\lambda_1 S^{-1} x^{(1)} \dots \lambda_k x^{(k)} S^{-1} AS_2] \\ &= [\lambda_1 e_1 \dots \lambda_k e_k S^{-1} AS_2] \\ &= \begin{pmatrix} \Lambda & C \\ 0 & D \end{pmatrix}, \quad \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k),\ \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = S^{-1}AS_2 \end{aligned}$$

Αντιστρόφως, αν ο S είναι αντιστρέψιμος, $S^{-1}AS = \begin{bmatrix} \Lambda & C \\ 0 & D \end{bmatrix}$ και $S = \begin{bmatrix} S_1 & S_2 \end{bmatrix}$ με $S_1 \in M_{n,k}$ τότε ο S_1 έχει γραμμικώς ανεξάρτητες στήλες και $\begin{bmatrix} AS_1 & AS_2 \end{bmatrix} = AS = S = \begin{bmatrix} \Lambda & C \\ 0 & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_1\Lambda & S_1C + S_2D \end{bmatrix}$. Έτσι, $AS_1 = S_1\Lambda$, άρα κάθε στήλη του S_1 είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του A.

Αν $k = n$ και $\{x^{(1)}, \dots, x^{(k)}\}$ μία βάση του $\mathbb{C}^n$ τέτοια ώστε $Ax^{(i)} = \lambda_i x^{(i)}$ για κάθε $i = 1, \dots, n$, θέτουμε $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ και $S = [x^{(1)}, \dots, x^{(n)}]$, ο οποίος είναι αντιστρέψιμος. Από τους προηγούμενους υπολογισμούς προκύπτει οτι $S^{-1}AS = \Lambda$. Αντίστροφα, αν ο S είναι αντιστρέψιμος και $S^{-1}AS = \Lambda$, τότε $AS = S\Lambda$, οπότε κάθε στήλη του S είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του A.

Οι τελευταίοι ισχυρισμοι σχετικά με τις ιδιοτιμές προκύπτουν απο το χαρακτηριστικό πολυώνυμο: $p_A(t) = p_\Lambda(t)p_D(t)$ αν $k < n$ και $p_A(t) = p_\Lambda(t)$ αν $k = n$. □

Σχόλιο. Η απόδειξη του θεωρήματος (2.3.2) είναι, κατ΄ αρχήν, ένας αλγόριθμος για τη διαγωνιοποίηση ενός διαγωνιοποιήσιμου πίνακα $A \in M_n(\mathbb{C})$, με τα εξής βήματα:

1. βρίσκουμε όλα τα n για τις ιδιοτιμές του A,

2. βρίσκουμε τα n αντίστοιχα και γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα και τέλος
3. κατασκευάζουμε τον πίνακα S.

Ωστόσο, εκτός από μικρά παραδείγματα αυτή δεν είναι μία πρακτική υπολογιστική διαδικασία.

Λήμμα 2.3.1. *Έστω $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ με $k \geq 2$ διακριτές ιδιοτιμές του $A \in M_n(\mathbb{C})$ (δηλαδή, $\lambda_i \neq \lambda_j$ αν $i = j$ και $1 \leq i, i \leq k$) και υποθέτουμε ότι $x^{(i)}$ είναι ένα ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχει στην λ_i για κάθε $i = 1, \ldots, k$. Τότε τα διανύσματα $x^{(1)}, \ldots, x^{(k)}$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα.*

Απόδειξη. Υποθέτουμε ότι υπάρχουν μιγαδικοί $\alpha_1, \ldots, \alpha_k$ έτσι ώστε $\alpha_1 x^{(1)} + \alpha_2 x^{(2)} + \ldots + \alpha_r x^{(r)} = 0$. Έστω $B_1 = (A - \lambda_2 I)(A - \lambda_3 I) \ldots (A - \lambda_k I)$ (παραλείπεται το $A - \lambda_i I$). Αφού το $x^{(i)}$ είναι ένα ιδιοδιάνυσμα με την αντίστοιχη ιδιοτιμή λ_i για κάθε $i = 1, \ldots, n$, έχουμε ότι $B_1 x^{(i)} = (\lambda_i - \lambda_2)(\lambda_i - \lambda_3) \ldots (A - \lambda_k) x^{(i)}$, που είναι μηδέν αν $2 \leq i \leq k$ (ένας από τους παράγοντες είναι μηδέν) και διάφορο του μηδενός αν $i = 1$ (κανένας παράγοντας δεν είναι μηδέν και $x^{(i)} \neq 0$). Έτσι,

$$\begin{aligned} 0 &= B_1(\alpha_1 x^{(1)} + \alpha_2 x^{(2)} + \ldots + \alpha_k x^{(k)}) \\ &= \alpha_1 B_1 x^{(1)} + \alpha_2 B_2 x^{(2)} + \ldots + \alpha_k B_k x^{(k)} \\ &= \alpha_1 B_1 x^{(1)} + 0 + \ldots + 0 = \alpha_1 B_1 x^{(1)} \end{aligned}$$

μας εξασφαλίζει ότι $\alpha_1 = 0$ αφού $B_1 x^{(1)} \neq 0$. Επαναλαμβάνοντας το ίδιο επιχείρημα για κάθε $j = 2, \ldots, k$ ορίζοντας τον B_j ως γινόμενο όπως ορίσαμε τον B_1, αλλά στον οποίο ο παράγοντας $A - \lambda_j I$ παραλείπεται. Για κάθε j βρίσκουμε ότι $\alpha_j = 0$, άρα $\alpha_1 = \alpha_2 = \ldots = \alpha_k = 0$, επομένως τα $x^{(1)}, \ldots, x^{(k)}$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα. □

Θεώρημα 2.3.3. *Αν $A \in M_n(\mathbb{C})$ ένας πίνακας με n διακριτές ιδιοτιμές, τότε ο A είναι διαγωνιοποιήσιμος.*

Απόδειξη. Έστω $x^{(i)}$ ένα ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ_i για κάθε $i = 1, \ldots, n$. Αφού όλες οι ιδιοτιμές είναι διαφορετικές, τότε από το Λήμμα (2.3.1), συνεπάγεται ότι τα διανύσματα $x^{(1)}, \ldots, x^{(k)}$ είναι γραμμικώς ανεξάρτητα. Τότε, από το Θεώρημα (2.3.2) συνεπάγεται οτι ο A είναι διαγωνιοποιήσιμος. □

Λήμμα 2.3.2. *Έστω δοθέντες πίνακες $B_1 \in M_{n_1}, \ldots, B_d \in M_{n_d}(\mathbb{C})$ και έστω B το ευθύ άθροισμα*

$$B = \begin{bmatrix} B_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & B_d \end{bmatrix} = B_1 \oplus \cdots \oplus B_d.$$

Τότε ο B είναι διαγωνιοποιήσιμος αν και μόνο αν καθένα από τους $B_1, \ldots, B_d$ είναι διαγωνιοποιήσιμος.

Απόδειξη. Αν για κάθε $i = 1, \ldots, d$ υπάρχει ένας αντιστρέψιμος $S_i \in M_{n_i}(\mathbb{C})$ τέτοιος ώστε $S_i^{-1} B_i S_i$ να είναι διαγώνιος, και αν ορίσουμε $S = S_1 \oplus \cdots \oplus S_d$, τότε μπορούμε να ελέγξουμε ότι ο $S^{-1} B S$ είναι διαγώνιος. Το αντίστροφο, το αποδεικνύουμε επαγωγικά. Δεν υπάρχει τίποτα να αποδειχθεί για $d = 1$. Υποθέτουμε ότι $d \geq 2$ και ο ισχυρισμός έχει θεμελιωθεί για ευθεία αθροίσματα με $d - 1$ ή λιγότερους όρους. Έστω $C =$

$B_1 \oplus \cdots \oplus B_{d-1}$, $n = n_1 + \cdots + n_{d-1}$ και $m = n_d$. Έστω $S \in M_{n+m}(\mathbb{C})$ αντιστρέψιμος έτσι ώστε

$$S^{-1}BS = S^{-1}(C \oplus B_d)S = \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_{n+m}).$$

Ξαναγράφουμε αυτήν την ταυτότητα ως $BS = S\Lambda$. Διαμερίζουμε $S = [s_1 s_2 \ldots s_{n+m}]$ με

$$s_i = \begin{bmatrix} \xi_i \\ \eta_i \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{n+m}, \quad \xi_i \in \mathbb{C}^n, \eta_i \in \mathbb{C}^m, i = 1, 2, \ldots, n+m.$$

Τότε $Bs_i = \lambda_i s_i$ συνεπάγεται ότι $C\xi_i = \lambda_i s_i$ και $B_d \eta_i = \lambda_i \eta_i$ για $i = 1, 2, \ldots, n+m$. Η τάξη γραμμών του $[\xi_1 \ldots \xi_{n+m}] \in M_{n,n+m}(\mathbb{C})$ είναι n επειδή ο πίνακας αυτός αποτελείται από τις πρώτες n γραμμές του αντιστρέψιμου πίνακα S. Έτσι, η τάξη στηλών του είναι επίσης n, οπότε η λίστα $\xi_1, \ldots, \xi_{n+m}$ περιέχει μια γραμμικά ανεξάρτητη λίστα n διανυσμάτων, καθένα από τα οποία είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του C. Το Θεώρημα (2.3.2) μας εξασφαλίζει ότι ο C είναι διαγωνιοποιήσιμος και η επαγωγική υπόθεση ότι οι όροι στο ευθύ άθροισμα, $B_1, \ldots, B_d$, είναι όλοι διαγωνιοποιήσιμοι. Η τάξη γραμμών του $[\eta_1 \ldots \eta_{n+m}] \in M_{n,n+m}(\mathbb{C})$ είναι m, άρα η λίστα $\eta_1, \ldots, \eta_{n+m}$ περιέχει μία γραμμικά ανεξάρτητη λίστα m διανυσμάτων, έπεται ότι ο B_d είναι επίσης διαγωνιοποιήσιμος. □

Ορισμός 2.3.3. *Δύο πίνακες $A, B \in M_n(\mathbb{C})$ ονομάζονται* **συγχρόνως διαγωνιοποιήσιμοι (simultaneously diagonalizable)** *αν υπάρχει ένας μοναδικός αντιστρέψιμος $S \in M_n(\mathbb{C})$ τέτοιος ώστε οι $S^{-1}AS$ και $S^{-1}BS$ να είναι και οι δύο διαγώνιοι.*

Θεώρημα 2.3.4. *Έστω $A, B \in M_n(\mathbb{C})$ διαγωνιοποιήσιμοι πίνακες. Τότε οι A και B μετατίθενται αν και μόνο αν είναι συγχρόνως διαγωνιοποιήσιμοι.*

Απόδειξη. Υποθέτουμε ότι A και B αντιμετατίθενται, εφαρμόζουμε έναν μετασχηματισμό ομοιότητας τόσο στον A όσο και στον B ο οποίος διαγωνιοποιεί τον A (αλλά όχι απαραίτητα τον B), και ομαδοποιεί τυχόν επαναλαμβανόμενες ιδιοτιμές του A. Αν $\mu_1, \ldots, \mu_d$ είναι οι διακριτές ιδιοτιμές του A και $n_1, \ldots, n_d$ είναι οι αντίστοιχες πολλαπλότητες τους, τότε μπορούμε να υποθέσουμε ότι

$$A = \begin{bmatrix} \mu_1 I_{n_1} & & & \mathbf{0} \\ & \mu_2 I_{n_2} & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & \mu_d I_{n_d} \end{bmatrix}, \quad \mu_i \neq \mu_j \text{ αν } i \neq j. \tag{2.7}$$

Αφού $AB = BA$, η Πρόταση (1.1.1) μας εξασφαλίζει ότι

$$B = \begin{bmatrix} B_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & B_d \end{bmatrix}, \quad \text{κάθε } B_i \in M_n(\mathbb{C}) \tag{2.8}$$

είναι μπλοκ διαγώνιος σύμμορφος με τον A. Αφού ο B είναι διαγωνοποιήσιμος, το Λήμμα (2.3.2) μας εξασφαλίζει ότι κάθε B_i είναι διαγωνοποιήσιμος. Έστω $T_i \in M_{n_i}(\mathbb{C})$ αντιστρέψιμος πίνακας και τέτοιος ώστε ο $T_i^{-1} B_i T_i$ να είναι διαγώνιος για κάθε $i = 1, \ldots, d$, και

$$T = \begin{bmatrix} T_1 & & & \mathbf{0} \\ & T_2 & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & T_d \end{bmatrix}. \tag{2.9}$$

Τότε $T_i^{-1}\mu_i I_{n_i} T_i = \mu_i I_{n_i}$, άρα οι $T^{-1}AT = A$ και $T^{-1}BT$ είναι και οι δύο διαγώνιοι. Για το αντίστροφο ισχύει ότι, οι A, B είναι συγχρόνως διαγωνιοποιήσιμοι, δηλαδή υπάρχει ένας $S \in M_n(\mathbb{C})$ έτσι ώστε οι $S^{-1}AS$ και $S^{-1}BS$ να είναι διαγώνιοι. Οι διαγώνιοι πίνακες μετατίθενται, δηλαδή $S^{-1}ASS^{-1}BS = S^{-1}BSS^{-1}AS$. Μετά από πράξεις παίρνουμε ότι $AB = BA$. □

Ορισμός 2.3.4. *Μία οικογένεια $\mathcal{F} \subset M_n(\mathbb{C})$ ονομάζεται συγχρόνως διαγωνιοποιήσιμη αν υπάρχει μοναδικός αντιστρέψιμος $S \in M_n(\mathbb{C})$ έτσι ώστε ο $S^{-1}AS$ να είναι διαγώνιος για κάθε $A \in \mathcal{F}$*

Θεώρημα 2.3.5. *Έστω $\mathcal{F} \subset M_n(\mathbb{C})$ μια οικογένεια διαγωνιοποιήσιμων πινάκων. Τότε η $\mathcal{F}$ είναι μία μεταθετική οικογένεια αν και μόνο αν είναι συγχρόνως διαγωνιοποιήσιμη οικογένεια. Επιπλέον, για κάθε δοσμένο $A_0 \in \mathcal{F}$ και για οποιεσδήποτε $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ ιδιοτιμές του A_0, υπάρχει ένας αντιστρέψιμος πίνακας $S \in M_n(\mathbb{C})$ τέτοιος ώστε οι $S^{-1}A_0S = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$* και $S^{-1}BS$ να είναι διαγώνιοι για κάθε $B \in \mathcal{F}$.

Απόδειξη. Αν η $\mathcal{F}$ είναι συγχρόνως διαγωνιοποιήσιμη, τότε υπάρχει ένας αντιστρέψιμος $T \in M_n(\mathbb{C})$ έτσι ώστε $T^{-1}AT$ να είναι διαγώνιος για κάθε $A \in \mathcal{F}$. Σύμφωνα με το Θεωρήμα 2.3.4 οι πίνακες αυτοί μετατίθενται ανά δύο, άρα η $\mathcal{F}$ είναι μία μεταθετική οικογένεια. Θα αποδείξουμε το αντίστροφο με επαγωγή. Αν $n = 1$, δεν χρείαζεται να το αποδείξουμε καθώς κάθε οικογένεια $\mathcal{F}$ είναι μεταθετική και διαγώνια. Υποθέτουμε ότι $n \geq 2$ και ότι, για κάθε $k = 1, 2, \ldots, n-1$, οποιαδήποτε μεταθετική οικογένεια $k \times k$ διαγωνιοποιήσιμων πινάκων είναι συγχρόνως διαγωνιοποιήσιμη. Αν κάθε πίνακας της $\mathcal{F}$ είναι βαθμωτός πίνακας, τότε δεν χρειάζεται να αποδείξουμε κάτι, επομένως μπορούμε να υποθέσουμε ότι ο $A \in \mathcal{F}$ είναι ένας $n \times n$ διαγωνιοποιήσιμος πίνακας με διακριτές ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_k$ και $k \geq 2$, ότι $AB = BA$ για κάθε $B \in \mathcal{F}$ και ότι κάθε $B \in \mathcal{F}$ είναι διαγωνιοποιήσιμος. Χρησιμοποιώντας το επιχείρημα από το Θεώρημα 2.3.4, αναγόμαστε στην περίπτωση που το A έχει τη μορφή (2.7). Αφού κάθε $B \in \mathcal{F}$ μετατίθεται με τον A, η Πρόταση 1.1.1 μας εξασφαλίζει ότι κάθε πίνακας $B \in \mathcal{F}$ έχει τη μορφή (2.8). Έστω $B, \hat{B}$, άρα $B = B_1 \oplus \cdots \oplus B_k$ και $\hat{B} = \hat{B}_1 \oplus \cdots \oplus \hat{B}_k$, όπου καθένας από τους $B_i, \hat{B}_i$ έχει το ίδιο μέγεθος και το μέγεθος αυτό είναι το πολύ $n-1$. Η μεταθετικότητα και η διαγωνισιμότητα των B και $\hat{B}$ συνεπάγονται μεταθετικότητα και διαγωνισιμότητα των B_i και $\hat{B}_i$ για κάθε $i = 1, \ldots d$. Από την επαγωγική υπόθεση, υπάρχουν k πίνακες ομοιότητας $T_1, T_2, \ldots, T_k$ κατάλληλου μεγέθους, καθένας από τους οποίους διαγωνιοποιεί τον αντίστοιχο μπλοκ κάθε πίνακα στην $\mathcal{F}$. Τότε το ευθύ άθροισμα (2.9) διαγωνιοποιεί κάθε πίνακα στην $\mathcal{F}$.

Δείξαμε ότι υπάρχει ένας αντιστρέψιμος πίνακας $T \in M_n(\mathbb{C})$ έτσι ώστε $T^{-1}BT$ να είναι διαγώνιος για κάθε $B \in \mathcal{F}$. Τότε $T^{-1}A_0T = P\operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)P^T$ για κάποιον πίνακα μετάθεσης P, $P^T(T^{-1}A_0T)P = (TP)^{-1}A_0(TP) = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ και $(TP)^{-1}B(TP) = P^T(T^{-1}BT)P$ είναι διαγώνιος για κάθε $B \in \mathcal{F}$ (από την υποενότητα 1.2.5). □

Κεφάλαιο 3

Ορθομοναδιαία Ομοιότητα

3.1 Ορθομοναδιαίοι πίνακες

Ορισμός 3.1.1. *Ένα σύνολο διανυσμάτων $x_1, \ldots, x_k \in \mathbb{C}^n$ ονομάζεται* **ορθογώνιο (orthogonal)** *αν ${x_i}^* x_j = 0$ για κάθε $i \neq j$, με $i, j \in \{1, \ldots, k\}$. Αν επιπλέον, ${x_i}^* x_i = 1$ για $i = 1, \ldots, k$ τότε το σύνολο ονομάζεται* **ορθοκανονικό (orthonormal)**.

Σχόλιο. Είναι συχνά βολικό να λέμε ότι $x_1, \ldots, x_k$ είναι ορθογώνια (αντίστοιχα, ορθοκανονικά) αντί για την πιο επίσημη δήλωση 'το σύνολο των διανυσμάτων $v_1, \ldots, v_k$ είναι ορθογώνιο (ορθοκανονικό, αντίστοιχα)'.

Θεώρημα 3.1.1. *Κάθε ορθοκανονικό σύνολο διανυσμάτων στο $\mathbb{C}^n$ είναι γραμμικά ανεξάρτητο.*

Απόδειξη. Έστω $\{x_1, \ldots, x_k\}$ ένα ορθοκανονικό σύνολο και $0 = \alpha_1 x_1 + \ldots + \alpha_k x_k$. Τότε $0 = (\alpha_1 x_1 + \ldots + \alpha_k x_k)^* (\alpha_1 x_1 + \ldots + \alpha_k x_k) = \sum_{i,j} \bar{\alpha}_i \alpha_j x_i^* x_j = \sum_{i=1}^{k} |\alpha_i|^2 x_i^* x_i = \sum_{i=1}^{k} |\alpha_i|^2$ επειδή τα διανύσματα x_i είναι ορθογώνια και κανονικοποιήμενα. Έτσι, όλα τα $\alpha_i = 0$ και άρα το $\{x_1, \ldots, x_k\}$ είναι ένα γραμμικά ανεξάρτητο σύνολο. □

Ορισμός 3.1.2. *Ο πίνακας $U \in M_n(\mathbb{C})$ ονομάζεται* **ορθομοναδιαίος (unitary)** *αν $U^* U = I$. Ένας πίνακας $U \in M_n(\mathbb{R})$ καλείται* **πραγματικός ορθογώνιος (real orthogonal)** *αν $U^T U = I$.*

Θεώρημα 3.1.2. *Αν $U \in M_n(\mathbb{C})$ τα ακόλουθα είναι ισοδύναμα*

(i) Ο U είναι ορθομοναδιαίος.

(ii) Ο U είναι αντιστρέψιμος και ισχύει ότι $U^* = U^{-1}$.

(iii) Ο U^* είναι ορθομοναδιαίος.

(iv) $UU^* = I$.

(v) Οι στήλες του U είναι ορθοκανονικές.

(vi) Οι γραμμές του U είναι ορθοκανονικές.

(vii) Για όλα τα $x \in \mathbb{C}^n$, $\|x\|_2 = \|U_x\|_2$, δηλαδή τα x και Ux έχουν την ίδια Ευκλείδεια νόρμα.

Απόδειξη. Από την (i) συνεπάγεται η (ii) αφού ο U^{-1} (όταν υπάρχει) είναι μοναδικός πίνακας. Ο ορισμός του ορθομοναδιαίου λέει ότι ο U είναι αντιστρέψιμος και $U^{-1} = U^*$.

Από την (ii) συνεπάγεται η (iii), αφού ισχύει ότι $BA = I$ αν και μόνο αν $AB = I$ για $A, B \in M_n(\mathbb{C})$.

Από την (iii) συνεπάγεται η (iv), αφού ισχύει ότι $(U^*)^* = U$.

Το αντίστροφο για κάθε μία από τις παραπάνω προτάσεις προκύπτει με παρόμοιο τρόπο, οπότε οι $(i) - (iv)$ είναι ισοδύναμες.

Διαμερίζουμε τον $U = \begin{bmatrix} u_1 \dots u_n \end{bmatrix}$ με βάση τις στήλες του. Τότε $U^*U = I$ σημαίνει ότι $u_i^* u_i = 1$ για όλα τα $i = 1, \dots, n$ και $u_i^* u_j = 0$ για όλα τα $i \neq j$. Έτσι, $U^*U = I$ είναι ένας άλλος τρόπος για να πούμε ότι οι στήλες του U είναι ορθοκανονικές και επομένως η (i) είναι ισοδύναμη με την (v). Ομοίως, οι (iv) και (vi) είναι ισοδύναμες.

Αν ο U είναι ορθομοναδιαίος και $y = Ux$, τότε $y^*y = x^*U^*Ux = x^*Ix = x^*x$, άρα η (i) συνεπάγεται την (vii). Για να αποδείξουμε το αντίστροφο έχουμε, έστω $U^*U = A = [\alpha_{ij}]$, $z, w \in C$ και παίρνουμε $x = z + w$ στην (vii). Τότε $x^*x = z^*z + w^*w + 2 \text{ Re } z^*w$ και $y^*y = x^*Ax = z^*Az + w^*Aw + 2 \text{ Re } z^*Aw$. Η (vii) μας εξασφαλίζει ότι $z^*z = z^*Az$ και $w^*w = w^*Aw$, και επομένως $\text{Re } z^*w = \text{Re } z^*Aw$ για οποιαδήποτε z και w. Παίρνουμε $z = e_p$ και $w = ie_q$ και υπολογίζουμε $\text{Re } ie_p^T e_q = 0 = \text{Re } ie_p^T A e_q = \text{Re } i\alpha_{pq} = -\text{Im } \alpha_{pq}$, άρα κάθε στοιχείο του A είναι πραγματικό. Τέλος, παίρνουμε $z = e_p$ και $w = e_q$ και υπολογίζουμε $e_p^T e_q = \text{Re } e_p^T e_q = \text{ Re } e_p^T A e_q = \alpha_{pq}$, το οποίο μας λέει ότι $A = I$ και ο U είναι ορθομοναδιαίος. □

Ορισμός 3.1.3. *Έστω $1 \leq i < j \leq n$ και*

$$G(\theta; i, j) = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & & & \\ & & & \cos\theta & & & & -\sin\theta & & & \\ & & & & 1 & & & & & & \\ & & & & & \ddots & & & & & \\ & & & & & & 1 & & & & \\ & & & \sin\theta & & & & \cos\theta & & & \\ & & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

συμβολίζει το αποτέλεσμα της αντικατάστασης των στοιχείων i, i και j, j του ταυτοτικού πίνακα $n \times n$ με $\cos\theta$, των στοιχείων i, j με $-\sin\theta$ και των στοιχείων j, i με $\sin\theta$. Ο πίνακας $G(\theta; i, j)$ ονομάζεται **επίπεδη περιστροφή (plane rotation)** *ή* **περιστροφή Givens (Givens rotation)**.

Παράδειγμα 3.1.1. Θεωρούμε τον πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 4 & 2 & 0 \\ 3 & 4 & 0 \end{bmatrix}.$$

Θα εφαρμόσουμε στον πίνακα περιστροφές Givens για να μετατρέψουμε τον πίνακα σε άνω τριγωνική μορφή. Για την πρώτη περιστροφή Givens έχουμε:

$$G_1 = \begin{bmatrix} c & -s & 0 \\ s & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

όπου $c = \cos(\theta) = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}$ και $s = \sin(\theta) = -\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}}$. Θεωρούμε $x = 0$ και $y = 4$, τότε $c = \frac{0}{4}$ και $s = -\frac{4}{4} = -1$.

$$G_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

$$G_1 A_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 4 & 2 & 0 \\ 3 & 4 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 3 & 4 & 0 \end{bmatrix}.$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 3 & 4 & 0 \end{bmatrix}$$

Για την δεύτερη περιστροφή Givens έχουμε:

$$G_2 = \begin{bmatrix} c & 0 & -s \\ 0 & 1 & 0 \\ c & 0 & s \end{bmatrix},$$

Θεωρούμε $x = 4$ και $y = 3$, τότε $c = \frac{4}{5} = 0.8$ και $s = \frac{-3}{5} = -0.6$.

$$G_2 = \begin{bmatrix} 0.8 & 0 & 0.6 \\ 0 & 1 & 0 \\ -0.6 & 0 & 0.8 \end{bmatrix}.$$

$$G_2 A_2 = \begin{bmatrix} 0.8 & 0 & 0.6 \\ 0 & 1 & 0 \\ -0.6 & 0 & 0.8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 3 & 4 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 4 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} 5 & 4 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

Για την τρίτη περιστροφή Givens έχουμε:

$$G_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c & -s \\ 0 & s & c \end{bmatrix},$$

Θεωρούμε $x = 1$ και $y = 2$, τότε $c = \frac{1}{2.236} = 0.447$ και $s = -\frac{2}{2.236} = -0.894$.

$$G_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.447 & 0.894 \\ 0 & -0.894 & 0.447 \end{bmatrix}.$$

$$G_3 A_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.447 & 0.894 \\ 0 & -0.894 & 0.447 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 4 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 4 & 0 \\ 0 & 2.236 & -0.447 \\ 0 & 0 & 0.894 \end{bmatrix}.$$

Ορισμός 3.1.4. *Έστω $w \in \mathbb{C}^n$ ένα μη μηδενικό διάνυσμα. Ο πίνακας $P_w \in M_n(\mathbb{C})$ με $P_w = I - 2(w^*w)^{-1}ww^*$ ονομάζεται* **Householder πίνακας** *ή* **ανακλαστής Householder (Householder reflector)**. *Αν το w είναι ένα μοναδιαίο διάνυσμα, τότε $P_w = I - 2ww^*$.*

Παράδειγμα 3.1.2. Θεωρούμε τον πίνακα

$$B = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & 5 \end{bmatrix}.$$

Θα εφαρμόσουμε στον πίνακα ανακλαστές Householder ώστε να μετατρέψουμε τον πίνακα σε άνω τριγωνική μορφή. Διαμορφώνουμε τον P_{w_1}:

Θεωρούμε $x_1 = [-1, 1, -1]^T$ και $\|x_1\|_2 = \sqrt{3}$.

$$\begin{aligned} w_1 &= x_1 - \|x_1\| e_1 \\ &= \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} - \sqrt{3} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2.7321 \\ 1.0000 \\ -1.0000 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$P_{w_1} = I - \frac{2w_1w_1^T}{w_1^Tw_1} = \begin{bmatrix} -0.5774 & 0.5774 & -0.5774 \\ 0.5774 & 0.7887 & 0.2113 \\ -0.5774 & 0.2113 & 0.7887 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} P_{w_1}B &= \begin{bmatrix} -0.5774 & 0.5774 & -0.5774 \\ 0.5774 & 0.7887 & 0.2113 \\ -0.5774 & 0.2113 & 0.7887 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & 5 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1.7321 & 2.8868 & -1.7321 \\ 0 & 1.5774 & 4.0000 \\ 0 & 0.4226 & 4.0000 \end{bmatrix} = B1. \end{aligned}$$

Διαμορφώνουμε τον P_{w_2}:

Θεωρούμε $x_2 = [0, 1.5774, 0.4226]^T$ και $\|x_2\|_2 = 1.6330$.

$$\begin{aligned} w_2 &= x_2 - \|x_2\| e_2 \\ &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1.5774 \\ 0.4226 \end{bmatrix} - 1.6330 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -0.0556 \\ 0.4226 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$P_{w_2} = I - \frac{2w_2w_2^T}{w_2^Tw_2} = \begin{bmatrix} 1.0000 & 0 & 0 \\ 0 & 0.9659 & 0.2588 \\ 0 & 0.2588 & -0.9659 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} P_{w_2}B1 &= \begin{bmatrix} 1.0000 & 0 & 0 \\ 0 & 0.9659 & 0.2588 \\ 0 & 0.2588 & -0.9659 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.7321 & 2.8868 & -1.7321 \\ 0 & 1.5774 & 4.0000 \\ 0 & 0.4226 & 4.0000 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1.7321 & 2.8868 & -1.7321 \\ 0 & 1.6330 & 4.8990 \\ 0 & 0 & -2.8284 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Παρατήρηση. Είναι εύκολο να επαληθεύσουμε ότι οι ανακλαστές Householder είναι ερμιτιανοί, δηλαδή $P_w = P_w^*$, και ότι $P_w^2 = I$. Από αυτό συμπεραίνουμε ότι ο P_w είναι ορθομοναδιαίος.

Οι περιστροφές επιπέδου και οι πίνακες Householder είναι ειδικοί (και πολύ απλοί) ορθομοναδιαίοι πίνακες που παίζουν σημαντικό ρόλο ορισμένων βασικών παραγοντοποιήσεων πινάκων, όπως θα δούμε και στο κεφαλαιο 5.

Οι πίνακες Householder και οι ορθομαναδιαίοι βαθμωτοί πίνακες μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή ενός ορθομοναδιαίου πίνακα ο οποίος παίρνει ένα οποιοδήποτε δεδομένο διάνυσμα στο $\mathbb{C}^n$ σε οποιοδήποτε άλλο διάνυσμα στο $\mathbb{C}^n$ που έχει την ίδια Ευκλείδεια νόρμα.

Θεώρημα 3.1.3. *Έστω $x, y \in \mathbb{C}^n$ και υποθέτουμε ότι $\|x\|_2 = \|y\|_2 > 0$. Αν $y = e^{i\theta}x$ για κάποιο πραγματικό θ, ορίζουμε $P(y,x) = e^{i\theta}I_n$. Διαφορετικά, έστω $\phi \in [0, 2\pi)$ τέτοιο ώστε $x^*y = e^{i\phi}|x^*y|$ (παίρνουμε $\phi = 0$ αν $x^*y = 0$). Έστω $w = e^{i\phi}x - y$ και $P(y,x) = e^{i\phi}P_w$ όπου $P_w = I - 2(w^*w)^{-1}ww^*$ είναι ένας Householder πίνακας. Τότε ο $P(y,x)$ είναι ορθομοναδιαίος και ερμητιανός πίνακας, $P(y,x)x = y$ και $P(y,x)z \perp y$ όταν $z \perp x$. Αν x και y είναι πραγματικοί, τότε ο $P(y,x)$ είναι πραγματικός ορθογώνιος: $P(y,x) = I$ αν $y = x$, και $P(y,x)$ είναι πραγματικός Householder πίνακας P_{y-x} διαφορετικά.*

Απόδειξη. Οι ισχυρισμοί επαληθεύονται εύκολα αν τα x και y εξαρτώνται γραμμικά, δηλαδή αν $y = e^{i\theta}x$ για κάποιον πραγματικό θ. Αν τα x και y είναι γραμμικά ανεξάρτητα, η ανισότητα Cauchy–Schwarz μας εξασφαλίζει ότι $x^*x \neq |x^*y|$. Υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} w^*w &= (e^{i\phi}x - y)^*(e^{i\phi}x - y) = x^*x - e^{-i\phi}x^*y - e^{i\phi}y^*x + y^*y \\ &= 2(x^*x - \mathrm{Re}(e^{-i\phi}x^*y)) = 2(x^*x - |x^*y|) \end{aligned}$$

και

$$w^*x = e^{-i\phi}x^*x - y^*x = e^{-i\phi}x^*x - e^{-i\phi}|y^*x| = e^{-i\phi}(x^*x - |x^*y|)$$

και τελικά,

$$e^{i\phi}P_wx = e^{i\phi}(x - 2(w^*w)^{-1}ww^*x) = e^{i\phi}(x - (e^{i\phi}x - y)e^{-i\phi}) = y.$$

Αν το z είναι ορθογώνιο στο x, τότε $w^*z = -y^*z$ και

$$\begin{aligned} y^*P(y,x)z &= e^{i\phi}\left(y^*z - \frac{1}{\|x\|_2^2 - |x^*y|}(e^{i\phi}y^*x - \|y\|_2^2)(-y^*x)\right) \\ &= e^{i\phi}(y^*z + (-y^*x)) = 0. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Αφού ο P_w είναι ορθομοναδιαίος και ερμιτιανός, $P(y,x) = (e^{i\phi}I)P_w$ είναι ορθομοναδιαίος (ως γινόμενο δύο ορθομαναδιαίων πινάκων) και ερμιτιανός.

□

3.2 QR Παραγοντοποίηση

Η ακόλουθη QR-παραγοντοποίηση ενός μιγαδικού ή πραγματικού πίνακα είναι σημαντικής θεωρητικής και υπολογιστικής σημασίας.

Θεώρημα 3.2.1. *Έστω $A \in M_{n,m}(\mathbb{C})$.*

(i) Αν $n \geq m$ υπάρχει ένας $Q \in M_{n,m}$ με ορθοκανονικές στήλες και ένας άνω τριγωνικός πίνακας $R \in M_m(\mathbb{C})$ με τα στοιχεία της κύριας διαγωνίου μη αρνητικά τέτοιος ώστε $A = QR$.

(ii) *Αν* $\operatorname{rank} A = m$ *τότε οι παράγοντες* Q *και* R *προσδιορίζονται μονοσήμαντα και τα στοιχεία στη κύρια διαγώνιο του* R *είναι όλα θετικά.*

(iii) *Αν* $m = n$ *τότε ο παράγοντας* Q *στην* (i) *είναι μοναδιαίος.*

(iv) *Υπάρχει ένας ορθομοναδιαίος* $Q \in M_n(\mathbb{C})$ *και ένας άνω τριγωνικός* $R \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ *με μη αρνητικά διαγώνια στοιχεία τέτοιος ώστε* $A = QR$.

(v) *Αν ο* A *είναι πραγματικός, τότε οι παράγοντες* Q *και* R *στις* (i), (ii), (iii) *και* (iv) *μπορούν να θεωρηθούν πραγματικοί.*

Απόδειξη. Έστω $\alpha_1 \in \mathbb{C}^n$ η πρώτη στήλη του A, $r_1 = \|\alpha_1\|_2$ και U_1 ένας ορθομοναδιαίος πίνακας τέτοιος ώστε $U_1\alpha_1 = r_1 e_1$. Από το Θεώρημα 3.1.3 μπορούμε να κατασκευάσουμε έναν τέτοιο πίνακα, ο οποίος είναι είτε ένας ορθομαδιαίος βαθμωτός πίνακας είτε το γινόμενο ενός ορθομοναδιαίου βαθμωτού πίνακα και ενός Householder πίνακα. Διαμέριση,

$$U_1 A = \begin{bmatrix} r_1 & \bigstar \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}$$

όπου $A_2 \in M_{n-1,m-1}$. Έστω $\alpha_2 \in \mathbb{C}^{n-1}$ η πρώτη στήλη του A_2 και $r_2 = \|\alpha_2\|_2$. Χρησιμοποιώντας ξανά το Θεώρημα 3.1.3 για να κατασκαυάσουμε έναν ορθομοναδιαίο πίνακα $V_2 \in M_{n-1}$ έτσι ώστε $V_2\alpha_2 = r_2 e_1$ και έστω $U_2 = I_1 \oplus V_2$. Τότε

$$U_2 U_1 A = \begin{bmatrix} r_1 & & \bigstar \\ 0 & r_2 & \\ 0 & 0 & A_3 \end{bmatrix}.$$

Επαναλαμβάνοντας την διαδικασία αυτή m φορές παίρνουμε

$$U_m U_{m-1} \dots U_2 U_1 A = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$$

όπου $R \in M_m(\mathbb{C})$ είναι άνω τριγωνικός πίνακας. Τα κύρια διαγώνια στοιχεία του είναι $r_1, \cdots, r_m$, τα οποία είναι όλα μη μηδενικά. Έστω $U = U_m U_{m-1} \dots U_2 U_1$. Διαμέριση $U^* = U_1^* U_2^* \cdots U_{m-1}^* U_m^* = \begin{bmatrix} Q & Q_2 \end{bmatrix}$, όπου $Q \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ έχει ορθοκανονικές στήλες (που αποτελείται από τις πρώτες m στήλες ενός ορθομοναδιαίου πίνακα). Τότε $A = QR$. Αν ο A έχει πλήρη τάξη στηλών, τότε ο R είναι αντιστρέψιμος, οπότε τα διαγώνια στοιχεία του είναι όλα θετικοί αριθμοί.

Υποθέτουμε ότι $\operatorname{rank} A = m$ και $A = QR = \tilde{Q}\tilde{R}$, όπου $R, \tilde{R}$ είναι άνω τριγωνικοί πίνακες με θετικά κύρια διαγώνια στοιχεία, και οι $Q, \tilde{Q}$ έχουν ορθοκανονικές στήλες. Τότε $A^*A = R^*(Q^*Q)R = R^*IR = R^*R$ και επιπλέον, $A^*A = \tilde{R}^*\tilde{R}$, οπότε $R^*R = \tilde{R}^*\tilde{R}$ και $\tilde{R}^{-*}R^* = \tilde{R}R^{-1}$. Αυτό λέει ότι ένας κάτω τριγωνικός πίνακας ισούται με έναν άνω τριγωνικό πίνακα, επομένως και οι δύο πρέπει να είναι διαγώνιοι: $\tilde{R}R^{-1} = D$ είναι διαγώνιος και πρέπει να έχει θετικά διαγώνια στοιχεία επειδή τα κύρια διαγώνια στοιχεία τόσο του $\tilde{R}$ όσο και του R^{-1} είναι θετικά. Όμως $\tilde{R} = DR$ οπότε $D = \tilde{R}R^{-1} = \tilde{R}^{-*}R^* = (DR)^{-*}R^* = D^{-1}R^{-*}R^* = D^{-1}$, άρα $D^2 = I$ και επομένως $D = I$. Συμπεραίνουμε ότι $\tilde{R} = R$ και επομένως $\tilde{Q} = Q$.

Ο ισχυρισμός στο (iii) προκύπτει από το γεγονός ότι ένας τετργωνικός πίνακας με ορθοκανονικές στήλες είναι ορθομοναδιαίος.

Αν $n \geq m$ στον (iv), μπορούμε να ξεκινήσουμε με την παραγοντοποίηση στο (i), έστω $\tilde{Q} = \begin{bmatrix} Q & Q_2 \end{bmatrix} \in M_n(\mathbb{C})$ ορθομοναδιαίος, $\tilde{R} = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \in M_{n,m}(\mathbb{C})$, και παρατηρούμε ότι $A = QR = \tilde{Q}\tilde{R}$. Αν $n < m$ μπορούμε να αναλάβουμε την κατασκευή στο (i), (αριστερός πολλαπλασιασμός με μια σειρά από βαθμωτούς πολλαπλούς Householder μετασχηματισμούς) και να σταματήσουμε μετά από n βήματα, όταν η παραγοντοποίηση $U_n \dots U_1 A = \begin{bmatrix} R & \bigstar \end{bmatrix}$ επιτευχθεί και ο R είναι άνω τριγωνικός πίνακας. Τα στοιχεία του μπλοκ $\bigstar$ δε χρειάζεται να είναι μηδενικά.

Ο τελευταίος ισχυρισμός (v) προκύπτει από το Θεώρημα 3.1.3 διότι οι ορθομοναδιαίοι πίνακες U_i που χρησιμοποιούνται για τις κατασκευές των (i) και (ii) μπορούν όλοι να επιλεγούν ως πραγματικοί. □

3.3 Ορθομοναδιαία Ομοιότητα

Ορισμός 3.3.1. *Έστω $A, B \in M_n(\mathbb{C})$. Λέμε ότι ο A είναι* **ορθομοναδιαία όμοιος** *με τον B αν υπάρχει ορθομοναδιαίος $U \in M_n(\mathbb{C})$ τέτοιος ώστε $A = UBU^*$. Αν ο U είναι πραγματικός (και επομένως είναι πραγματικός ορθογώνιος), τότε ο A ονομάζεται* **πραγματικός ορθογώνια όμοιος** *με τον B. Λέμε ότι ο A είναι* **ορθομοναδιαία διαγωνιοποιήσιμος** *αν είναι ορθομοναδιαία όμοιος με έναν διαγώνιο πίνακα. Ο A είναι* **πραγματικός ορθογώνια διαγωνιοποιήσιμος** *αν είναι πραγματικός ορθογώνια όμοιος με έναν διαγώνιο πίνακα.*

Θεώρημα 3.3.1. *Έστω $U \in M_n(\mathbb{C})$ και $V \in M_m(\mathbb{C})$ ορθομοναδιαίοι, $A = [a_{ij}] \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ και $B = [b_{ij}] \in M_{n,m}(\mathbb{C})$, και υποθέτουμε ότι $A = UBV$. Τότε $\sum_{i,j=1}^{n,m} |b_{ij}|^2 = \sum_{i,j=1}^{n,m} |a_{ij}|^2$. Συγκεκριμένα, αυτή η ταυτότητα ικανοποιείται εάν $m = n$ και $V = U^*$, δηλαδή, αν το A είναι ορθομοναδιαία όμοιο με το B.*

Απόδειξη. Αρκεί να ελέγξουμε ότι $\mathrm{tr}B^*B = \mathrm{tr}A^*A$. Υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}A^*A &= \mathrm{tr}(UBV)^*(UBV) = \mathrm{tr}(V^*B^*U^*UBV) \\ &= \mathrm{tr}V^*B^*BV = \mathrm{tr}B^*BVV^* \\ &= \mathrm{tr}B^*B. \end{aligned}$$

□

Κεφάλαιο 4

Τριγωνοποίηση Schur

4.1 Ορθομοναδιαίες και Πραγματικές Ορθογώνιες Τριγωνοποιήσεις

Θεώρημα 4.1.1 (Τριγωνοποίση Schur). *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$ πίνακας με $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ ιδιοτιμές και έστω $x \in \mathbb{C}^n$ ένα μοναδιαίο διάνυσμα έτσι ώστε $Ax = \lambda_1 x$.*

(i) Υπάρχει ένας ορθομοναδιαίος $U = [x\, u_2 \ldots u_n] \in M_n(\mathbb{C})$ τέτοιος ώστε $U^*AU = T = [t_{ij}]$ να είναι ανώ τριγωνικός πίνακας με διαγώνια στοιχεία $t_{ii} = \lambda_i$, $i = 1, \ldots, n$.

(ii) Αν ο $A \in M_n(\mathbb{R})$ έχει μόνο πραγματικές ιδιοτιμές, τότε το x μπορει να επιλεγεί ως πραγματικό και υπάρχει ένας πραγματικός ορθογώνιος $Q = [x\, q_2 \ldots q_n] \in M_n(\mathbb{R})$ τέτοιος ώστε $Q^TAQ = T = [t_{ij}]$ να είναι άνω τριγωνικός πίνακας με διαγώνια στοιχεία $t_{ii} = \lambda_i$ με $i = 1, \ldots, n$

Απόδειξη. Έστω x ένα κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα του A και λ_1 η αντίστοιχη ιδιοτιμή του, δηλαδή, $x^*x = 1$ και $Ax = \lambda_1 x$. Έστω $U_1 = [x\, u_2\, \ldots\, u_n]$ ένας ορθομοναδιαίος πίνακας του οποίου η πρώτη στήλη είναι x. Τότε,

$$\begin{aligned}
U_1^*AU_1 &= U_1^* \begin{bmatrix} Ax & Au_2 & \ldots & Au_n \end{bmatrix} = U_1^* \begin{bmatrix} \lambda_1 x & Au_2 & \ldots & Au_n \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} x^* \\ u_2^* \\ \vdots \\ u_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 x & Au_2 & \ldots & Au_n \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \lambda_1 x^*x & x^*Au_2 & \ldots & x^*Au_n \\ \lambda_1 u_2^* x & & & \\ \vdots & & A_1 & \\ \lambda_1 u_n^* x & & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \bigstar \\ 0 & A_1 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

επειδή οι στήλες του U_1 είναι ορθοκανονικές. Οι ιδιοτιμές του υποπίνακα $A_1 = [u_1^*Au_j]_{i,j=2}^n \in M_{n-1}$ είναι $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$. Αν $n = 2$, έχουμε πετύχει την επιθυμητή ορθομοναδιαία τριγωνοποίηση. Αν όχι, τότε έστω $\xi \in C^{n-1}$ ένα μοναδιαίο ιδιοδιάνυσμα του A_1 με αντίστοιχη ιδιοτιμή λ_2, και εφαρμόζουμε την προηγούμενη αναγωγή στον A_1. Αν $U_2 \in M_{n-1}$ ένας ορθομοναδιαίος πίνακας του οποίου η πρώτη στήλη είναι ξ, τότε

$$U2^*A_1U_2 = \begin{bmatrix} \lambda_2 & \bigstar \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}.$$

Θέτουμε $V_2 = [1] \oplus U_2$ και υπολογίζουμε την ορθομοναδιαία ομοιότητα

$$(U_1V_2)^*AU_1V_2 = V_2^*U_1^*AU_1V_2 = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \bigstar & \bigstar \\ 0 & \lambda_2 & \bigstar \\ 0 & 0 & A_2 \end{bmatrix}.$$

Συνεχίζουμε τη διαδικασία αυτή για να κατασκευάσουμε ορθομοναδιαίους πίνακες $U_i \in M_{n-i+1}$, $i = 1, \ldots, n-1$ και ορθομοναδιαίους πινάκες $V_i \in M_n(\mathbb{C}), i = 2, \ldots, n-2$. Ο πίνακας $U = U_1V_2V_3 \ldots V_{n-2}$ είναι ορθομοναδιαίος και ο U^*AU είναι άνω τριγωνικός.

Αν όλες οι ιδιοτιμές του $A \in M_n(\mathbb{R})$ είναι πραγματικές, τότε όλα τα ιδιοδιανύσματα και οι ορθομοναδιαίοι πίνακες στον προηγούμενο αλγόριθμο μπορούν να επιλεγούν ως πραγματικές. □

Η τριγωνοποίηση Schur δεν είναι μοναδική. Οι ιδιοτιμές μπορούν να ταξινομηθούν με οποιαδήποτε σειρά στη διαγώνιο του T.

Παράδειγμα 4.1.1. Αν οι ιδιοτιμές του A αναδιαταχθούν και πραγματοποιήσουμε την αντίστοιχη άνω τριγωνοποίηση (4.1.1), τότε τα στοιχεία του T πάνω από τη κύρια διαγώνιο μπορεί να είναι διαφορετικά. Θεωρούμε,

$$T_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 4 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}, T_2 = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 3\sqrt{2} \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}, U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{bmatrix}$$

Παρατηρούμε ότι ο U είναι ορθομοναδιαίος και $T_2 = UT_1U^*$.

Λήμμα 4.1.1. *Υποθέτουμε ότι ο $A \in M_n(\mathbb{R})$ έχει μια μη πραγματική ιδιοτιμή λ τέτοια ώστε $\lambda = a + ib$ με $a, b \in \mathbb{R}$ και $b > 0$. Έστω x ένα ιδιοδιάνυσμα του A που αντιστοιχεί στη λ ιδιοτιμή και $x = u + iv$ με $u, v \in \mathbb{R}^n$.*

(i) $\bar{\lambda}, \bar{x}$ είναι ένα ιδιοζεύγος του A.

(ii) u και v είναι γραμμικά ανεξάρτητα.

(iii) Υπάρχει ένας αντιστρέψιμος πίνακας $S \in M_n(\mathbb{R})$ έτσι ώστε $S^{-1}AS = \begin{bmatrix} B & \bigstar \\ 0 & A_1 \end{bmatrix}$, όπου $A_1 \in M_{n-2}(\mathbb{R})$ και $B = \begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix}$. Έτσι, ένας πραγματικός τετραγωνικός πίνακας με μη πραγματική ιδιοτιμή λ είναι πραγματικός όμοιος με έναν 2×2 άνω τριγωνικό μπλοκ πίνακα του οποίου το άνω αριστερό μπλοκ φανερώνει τα πραγματικά και τα φανταστικά μέρη του λ.

(iv) Η πολλαπλότητα καθενός από τα λ και $\bar{\lambda}$ ως ιδιοτιμή του A_1 είναι 1 λιγότερο από την πολλαπλότητα του ως ιδιοτιμή του A.

Απόδειξη. (i) Αφού $A \in M_n(\mathbb{R})$, παίρνουμε μιγαδικό συζυγές και στις δύο πλευρές του $Ax = \lambda x$ και παίρνουμε ότι $\bar{A}\bar{x} = A\bar{x} = \lambda\bar{x}$.

(ii) Τα x και $\bar{x}$ είναι ιδιοδιανύσματα του A που αντιστοιχούν σε διαφορετικές ιδιοτιμές, αφού $\lambda \neq \bar{\lambda}$. Από το Λήμμα 2.3.1, τα x και $\bar{x}$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα. Υποθέτουμε ότι $au + \beta v = 0$ με $a, \beta \in \mathbb{R}$. Αντικαθιτούμε u, v με $\frac{x+\bar{x}}{2}$, $\frac{x-\bar{x}}{2i}$, αντίστοιχα. Τότε έχουμε $a(\frac{x+\bar{x}}{2}) + \beta(\frac{x-\bar{x}}{2i}) = (\frac{a-i\beta}{2})x + (\frac{a+i\beta}{2})\bar{x} = 0$, άρα $a - i\beta = a + i\beta = 0$. Επομένως, $a = b = 0$ και u, v είναι γραμμικά ανεξάρτητα.

(iii) Αφού τα u, v είναι γραμμικά ανεξάρτητα, μπορούμε να επιλέξουμε οποιονδήποτε $S_1 = [s_3 \cdots s_n]$ έτσι ώστε $\{u, v, s_3, \ldots, s_n\}$ να είναι βάση του $\mathbb{R}^n$. Ο $S = [u\, v\, S_1]$ γραμμικά ανεξάρτητες στήλες, άρα είναι αντιστρέψιμος. Ξέρουμε ότι $Au + iAv = Ax = \lambda x = (a+bi)(u+iv) = (au-bv)+i(bu+av)$. Εξισώνοντας το πραγματικό και το φανταστικό μέρος της ταυτότητας δείχνουμε ότι $A[u\ v] = [u\ v]B$, όπου $B = \begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix}$. Έτσι, με $S^{-1}[u\ v] = \begin{bmatrix} I_2 \\ 0 \end{bmatrix}$, παίρνουμε ότι

$$S^{-1}AS = S^{-1}\begin{bmatrix} A[u\ v] & AS_1 \end{bmatrix} = S^{-1}\begin{bmatrix} [u\ v]B\ AS_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B & \bigstar \\ 0 & A_1 \end{bmatrix}$$

όπου $A_1 \in M_n(\mathbb{R})$, αφού όλοι οι πίνακες στην προηγούμενη ταυτότητα είναι πραγματικοί.

(iv) Από το Θεώρημα 2.3.1, γνωρίζουμε ότι η ομοιότητα διατηρεί το χαρακτηριστικό πολυώνυμο, άρα $p_A(t) = p_B(t)p_{A_1}(t) = (t-\lambda)(t-\bar{\lambda})p_{A_1}(t)$.

□

Θεώρημα 4.1.2 (Πραγματική μορφή Schur). *Έστω $A \in M_n(\mathbb{R})$.*

(i) Υπάρχει ένας πραγματικός αντιστρέψιμος πίνακας $S \in M_n(\mathbb{R})$ τέτοιος ώστε ο $S^{-1}AS$ να είναι ένας πραγματικός άνω σχεδόν τριγωνικός πίνακας της μορφής

$$\begin{bmatrix} A_1 & & & \bigstar \\ & A_2 & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & A_m \end{bmatrix}, \text{ όπου κάθε } A_i \text{ είναι } 1\times 1 \text{ ή } 2\times 2 \tag{4.1}$$

με τις ακόλουθες ιδιότητες:

(α΄) τα 1×1 διαγώνια μπλοκ του απεικονίζουν τις πραγματικές ιδιοτιμές του A.

(β΄) καθένα από τα 2×2 διαγώνια μπλοκ του έχουν μια ιδιαίτερη μορφή που απεικονίζουν ένα συζυγές ζεύγος των μη πραγματικών ιδιοτιμών του A, δηλαδή

$$\begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix}, a, b \in \mathbb{R},\ b > 0 \text{ και } a \pm ib \text{ είναι ιδιοτιμές του } A \tag{4.2}$$

(γ΄) τα διαγώνια μπλοκ του καθορίζονται πλήρως απο τις ιδιοτιμές του A και μπορούν να εμφανιστούν με οποιαδήποτε προβλεπόμενη σειρά.

(ii) Υπάρχει ένας πραγματικός ορθογώνιος πίνακας $Q \in M_n(\mathbb{R})$ τέτοιος ώστε ο Q^TAQ να είναι ένας πραγματικός άνω σχεδόν τριγωνικός πίνακας με τις ακόλουθες ιδιότητες:

(α΄) *τα 1×1 διαγώνια μπλοκ του απεικονίζουν τις πραγματικές ιδιοτιμές του A,*

(β΄) *καθένα από τα 2×2 διαγώνια μπλοκ του έχει ένα συζυγές ζεύγος μη πραγματικών ιδιοτιμών (χωρίς ιδιαίτερο τύπο),*

(γ΄) *η διάταξη των διαγώνιων μπλοκ του μπορεί να ορισθεί ως εξής: Αν οι πραγματικές ιδιοτιμές και τα συζυγή ζεύγη μη πραγματικών ιδιοτιμών του A παρατίθενται σε μια προδιαγεγραμμένη σειρά, τότε οι πραγματικές ιδιοτιμές και τα συζυγή ζεύγη των μη πραγματικών ιδιοτιμών των αντίστοιχων διαγώνιων μπλοκ $A_1, \ldots, A_m$ του $Q^T AQ$ έχουν την ίδια σειρά.*

Απόδειξη. (i) Δεδομένου οποιουδήποτε πραγματικού ιδιοζεύγους λ, x, η απόδειξη του Θεωρήματος 4.1.1 δείχνει πως να υποτιμήσουμε (deflate) έναν πίνακα A με μια πραγματική ορθογώνια ομοιότητα. Αυτή η υποτίμηση (deflation) παράγει έναν πραγματικό 1×1 διαγώνιο μπλοκ και έναν πίνακα της μορφής

$$\begin{bmatrix} \lambda & * \\ 0 & A \end{bmatrix}.$$

Από την άλλη πλευρά, δεδομένου ενός ιδιοζεύγους λ, x του οποίου η ιδιοτιμή δεν είναι πραγματική εφαρμόζουμε το προηγούμενο Λήμμα 2.6 για να υποτιμήσουμε (deflate) τον A μέσω μιας πραγματικής ομοιότητας. Η υποτίμηση (deflation) αυτή παράγει έναν πραγματικό 2×2 μπλοκ πίνακα B της ειδικής μορφής (4.2) και έναν πίνακα της μορφής

$$\begin{bmatrix} B & * \\ 0 & A \end{bmatrix}.$$

Μόνο πεπερασμένες υποτιμήσεις (deflations) απαιτούνται για να κατασκευάσουμε έναν αντιστρέψιμο πίνακα S έτσι ώστε ο $S^{-1}AS$ να έχει την ισχυρή άνω σχεδόν τετραγωνική μορφή. Μπορούμε να ελέγξουμε τη σειρά με την οποία εμφανίζονται τα διαγώνια μπλοκ επιλέγοντας σε κάθε βήμα αποσύνθεσης, μια συγκεκριμένη ιδιοτιμή και το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα.

(ii) Υποθέτουμε ότι έχει δοθεί μία διάταξη των πραγματικών και συζυγών μη πραγματικών ζευγών ιδιοτιμών του A, και έστω S ένας αντιστρέψιμος πραγματικός πίνακας έτσι ώστε ο $S^{-1}AS$ να έχει τη μορφή (4.1) με διαγώνια μπλοκ στην προβλεπόμενη σειρά. Χρησιμοποιούμε το Θεώρημα 3.2.1 για να παραγοντοποιήσουμε τον S ως $S = QR$, όπου Q είναι πραγματικός ορθογώνιος πίνακας και R είναι πραγματικός και άνω τριγωνικός πίνακας. Διαμερίζουμε τον R σύμφωνα με την (4.1) και υπολογίζουμε το $S^{-1}AS = R^{-1}Q^T AQR$, έτσι

$$\begin{aligned} Q^T AQ &= R \begin{bmatrix} A_1 & & & \bigstar \\ & A_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & A_m \end{bmatrix} R^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} R_{11}A_1R_{11}^{-1} & & & \bigstar \\ & R_{22}A_2R_{22}^{-1} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & R_{mm}A_mR_{mm}^{-1} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

είναι άνω ημίτετραγωνικός, όπου τα 1×1 διαγώνια μπλοκ του είναι ίδια με αυτά της (4.1) και τα 2×2 διαγώνια μπλοκ του είναι όμοια με τα αντίστοιχα μπλοκ της (4.1).

□

4.2 Συνέπειες του Θεωρήματος Τριγωνοποίησης του Schur

4.2.1 Το ίχνος και η ορίζουσα

Έστω ότι ο $A \in M_n(\mathbb{C})$ έχει ιδιοτιμές $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$. Με τη βοήθεια του χαρακτηριστικού πολυωνύμου έχουμε ότι $\sum_{i=1}^n \lambda_i = \mathrm{tr}A$, $\sum_{i=1}^n \prod_{j \neq i}^n \lambda_j = \mathrm{tr}(\mathrm{adj}\ A)$, και $\det A = \prod_{i=1}^n \lambda_i$.

Για κάθε αντιστρέψιμο πίνακα $S \in M_n(\mathbb{C})$, έχουμε ότι

$$\mathrm{tr}(S^{-1}AS) = \mathrm{tr}(ASS^{-1}) = \mathrm{tr}A,$$

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\mathrm{adj}\ (S^{-1}AS)) &= \mathrm{tr}((\mathrm{adj}\ S)(\mathrm{adj}\ A)(\mathrm{adj}\ S^{-1})) \\ &= \mathrm{tr}((\mathrm{adj}\ S)(\mathrm{adj}\ A)(\mathrm{adj}\ S)^{-1}) \\ &= \mathrm{tr}(\mathrm{adj}\ A)\end{aligned}$$

και

$$\det(S^{-1}AS) = (\det S^{-1})(\det A)(\det S) = (\det S)^{-1}(\det A)(\det S) = \det A.$$

Έτσι, τα $\mathrm{tr}A$, $\mathrm{tr}(\mathrm{adj}\ A)$, και $\det A$ μπορούν να αξιολογηθούν χρησιμοποιώντας οποιοδήποτε πίνακα όμοιο με τον A. Ο άνω τριγωνικος πίνακας $T = [t_{ij}]$ στο Θεώρημα (4.1.1) είναι χρήσιμος για το σκοπό αυτό, αφού τα κύρια διαγώνια στοιχεία $t_{11}, \ldots, t_{nn}$ είναι οι ιδιοτιμές του A, $\mathrm{tr}\ T = \sum_{i=1}^n t_{ii}$, $\det T = \prod_{i=1}^n t_{ii}$ και τα στοιχεία της κύριας διαγωνίου του adj T είναι τα $\prod_{j \neq i}^n t_{jj}, \ldots, \prod_{j \neq n}^n t_{jj}$.

4.2.2 Οι ιδιοτιμές ενός πολυωνύμου του A

Έστω ότι ο $A \in M_n(\mathbb{C})$ έχει ιδιοτιμές $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ και έστω $p(t)$ ένα πολυώνυμο. Γνωρίζουμε ότι το $p(\lambda_i)$ είναι μία ιδιοτιμή του $p(A)$ για κάθε $i = 1, \ldots, n$ και αν μ είναι μία ιδιοτιμή του $p(A)$, τότε υπάρχει κάποιο $i \in \{1, \ldots, n\}$ τέτοιο ώστε $\mu = p(\lambda_i)$. Αυτές οι παρατηρήσεις προσδιορίζουν τις διακριτές ιδιοτιμές του $p(A)$ (δηλαδή το φάσμα (2.1.2), αλλά όχι τις πολλαπλότητες του. Τις πολλαπλότητες τις προσδιορίζουμε με τη βοήθεια του Schur Θεωρήματος (4.1.1).

Έστω $A = UTU^*$, όπου U είναι ορθομοναδιαίος και $T = [t_{ij}]$ είναι άνω τριγωνικός πίνακας με στοιχεία στην κύρια διαγώνιο $t_{11} = \lambda_1, t_{22} = \lambda_2, \ldots, t_{nn} = \lambda_n$. Τότε $p(A) = p(UTU^*) = Up(T)U^*$. Τα στοιχεία της κύριας διαγωνίου του $p(T)$ είναι $p(\lambda_1), p(\lambda_2), \ldots, p(\lambda_n)$, άρα είναι οι ιδιοτιμές (συμπεριλαμβανομένου και της πολλαπλότητας) του $p(T)$ και επομένως και του $p(A)$. Συγκεκριμένα, για κάθε $k = 1, 2, \ldots,$ οι ιδιοτιμές του A^k είναι $\lambda_1^k, \ldots, \lambda_n^k$ και

$$\mathrm{tr}\ A^k = \lambda_1^k + \cdots + \lambda_n^k. \tag{4.3}$$

4.2.3 Το θεώρημα Cayley- Hamilton

Λήμμα 4.2.1. *Υποθέτουμε ότι $R = [r_{ij}]$, $T = [t_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$ είναι άνω τριγωνικοί πίνακες και $r_{ij} = 0,\ 1 \leq i, j \leq k < n$ και $t_{k+1,k+1} = 0$. Έστω $S = [s_{ij}] = RT$. Τότε, $s_{ij} = 0$, $1 \leq i, j \leq k+1$.*

Απόδειξη. Οι υποθέσεις περιγράφουν δύο πίνακες R και T της μορφής

$$R = \begin{bmatrix} 0_k & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{bmatrix}, \qquad T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{bmatrix}, \quad T_{11} \in M_k$$

όπου R_{22}, T_{11} και T_{22} είναι άνω τριγωνικοί και η πρώτη στήλη του T_{22} ειναι μηδεν. Το γινόμενο RT είναι απαραίτητα άνω τριγωνικός. Πρέπει να δείξουμε ότι έχει έναν μηδενικό άνω-αριστερό κύριο υποπίνακα μεγέθους $k+1$. Διαχωρίζουμε τον $T_{22} = [0Z]$ για να φανερώσουμε τη πρώτη στήλη του και εκτέλουμε έναν πολλαπλασιασμό μπλοκ

$$RT = \begin{bmatrix} 0_k T_{11} + R_{12} 0 & 0_k T_{12} + R_{12}[0\ Z] \\ 0 T_{11} + R_{22} 0 & 0 T_{12} + R_{22}[0\ Z] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0_k & [0_k\ R_{12}Z] \\ 0 & [0_k\ R_{22}Z] \end{bmatrix}$$

που φανερώνει τον επιθυμητό μηδενικό άνω-αριστερό κύριο υποπίνακα μεγέθους $k+1$. □

Θεώρημα 4.2.1 (Cayley- Hamilton)**.** *Έστω $p_A(t)$ το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του $A \in M_n(\mathbb{C})$. Τότε $p_A(A) = 0$.*

Απόδειξη. Παραγοντοποιούμε $p_A(t) = (t - \lambda_1)(t - \lambda_2) \cdots (t - \lambda_n)$ όπως στην (2.5) και χρησιμοποιούμε το Θεώρημα 4.1.1 για να γράψουμε τον A ως $A = UTU^*$, όπου ο U είναι ορθομοναδιαίος, ο T είναι άνω τριγωνικός, με $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ στοιχεία της κύριας διαγωνίου του. Υπολογίζουμε

$$\begin{aligned} p_A(A) &= p_A(UTU^*) = Up_A(T)U^* \\ &= U[(T - \lambda_1 I)(T - \lambda_2 I) \cdots (T - \lambda_n I)]U^* \end{aligned}$$

Αρκέι να δείξουμε ότι $p_A(t) = 0$. Το άνω αριστερό 1×1 μπλοκ του $T - \lambda_1 I$ είναι μηδέν, και το στοιχείο $2, 2$ του $T - \lambda_2 I$ είναι μηδέν, οπότε το προηγούμενο λήμμα μας εξασφαλίζει ότι ο άνω αριστερός 2×2 κύριος υποπίνακας του $(T - \lambda_1 I)(T - \lambda_2 I)$ είναι μηδέν. Υποθέτουμε ότι ο άνω αριστερός $k \times k$ υποπίνακας του $(T - \lambda_1 I) \ldots (T - \lambda_k I)$ είναι μηδέν. Το στοιχείο $k+1$, $k+1$ του $(T - \lambda_{k+1} I)$ είναι μηδέν, οπότε επικαλούμενοι ξανά το λήμμα, ξέρουμε ότι ο άνω αριστερός κύριος υποπίνακας του $(T - \lambda_1 I) \cdots (T - \lambda_{k+1} I)$ μεγέθους $k+1$, είναι μηδέν. Με επαγωγή, συμπεραίνουμε ότι $((T - \lambda_1 I) \ldots (T - \lambda_{n-1} I))(T - \lambda_n I) = 0$. □

Παράδειγμα 4.2.1. Έστω

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ -2 & 0 \end{bmatrix}.$$

Τότε $p_A(t) = t^2 - 3t + 2$, άρα

$$\begin{aligned}
A^2 - 3A + 2I &= 0 \quad \Rightarrow \\
A^2 &= 3A - 2I, \quad \xRightarrow{\cdot A} \\
A^3 &= A(A^2) \quad \Rightarrow \\
&= 3A^2 - 2A \\
&= 3(3A - 2I) - 2A \\
&= 7A - 6I \quad \Rightarrow \\
A^4 &= 7A^2 - 6A \quad \xRightarrow{\cdot A} \\
&= 15A - 14I
\end{aligned}$$

κ.ο.κ. Επιπλέον, μπορούμε να εκφράσουμε αρνητικές δυνάμεις αντιστρέψιμου πίνακα A σαν γραμμικούς συνδυασμούς των A και I. Γράφουμε

$$A^2 - 3A + 2I = 0$$

ως εξής

$$2I = -A^2 + 3A = A(-A + 3I)$$

ή

$$I = A\left[\frac{1}{2}(-A + 3I)\right].$$

Έτσι,

$$\begin{aligned}
A^{-1} &= -\frac{1}{2}A + \frac{3}{2}I \\
&= \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{3}{2} \end{bmatrix} \quad \xRightarrow{\cdot A^{-1}} \\
A^{-2} &= (-\frac{1}{2}A + \frac{3}{2}I)^2 \\
&= \frac{1}{4}A^2 - \frac{3}{2}A + \frac{9}{4}I \\
&= \frac{1}{4}(3A - 2I) - \frac{3}{2}A + \frac{9}{4}I \\
&= -\frac{3}{4}A + \frac{7}{4}I
\end{aligned}$$

κ.ο.κ.

Πόρισμα 4.2.1. *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$ ένας αντιστρέψιμος πίνακας και $p_A(t) = t^n + \alpha_{n-1}t^{n-1} + \cdots + \alpha_1 t + \alpha_0$. Θέτουμε $q(t) = -(t^{n-1} + \alpha_{n-1}t^{n-2} + \cdots + \alpha_2 t + \alpha_1)/\alpha_0$. Τότε $A^{-1} = q(A)$ είναι ένα πολυώνυμο του A.*

Απόδειξη. Γράφουμε το $p_A(A) = 0$ ως

$$A(A^{n-1} + \alpha_{n-1}A^{n-2} + \cdots + \alpha_2 A + \alpha_1 I) = -\alpha_0 I,$$

δηλαδή $Aq(A) = I$. □

Παράδειγμα 4.2.2. Γνωρίζουμε ότι κάθε $A \in M_n(\mathbb{C})$ ικανοποιεί μία πολυωνυμική εξίσωση βαθμου n, για παράδειγμα, τη χαρακτηριστική του εξίσωση. Ωστόσο, είναι δυνατόν ένας πίνακας $A \in M_n(\mathbb{C})$ να ικανοποιεί μια πολυωνυμική εξίσωση βαθμου μικρότερου του n. Θεωρούμε

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in M_3.$$

Το χαρακτηριστικό πολυώνυμο είναι το $p_A(t) = (t-1)^3$ και πράγματι $(A-I)^3 = 0$. Αλλά $(A-I)^2 = 0$, άρα ο A ικανοποιεί μία πολυωνυμική εξίσωση βαθμού 2. Οπότε, δεν υπάρχει πολυώνυμο $h(t) = t + \alpha_0$ βαθμού 1 τέτοιο ώστε $h(A) = 0$ αφού $h(A) = A + \alpha_0 I \neq 0$ για όλα τα $\alpha_0 \in \mathbb{C}$.

4.2.4 Το θεώρημα του Sylvester σε πίνακα γραμμικών εξισώσεων

Η εξίσωση $AX - XA = 0$ που σχετίζεται με την μεταθετικότητα είναι ειδική περίπτωση της γραμμικής εξίσωσης πίνακα $AX - XB = C$, η οποία ονομάζεται και **εξίσωση του Sylvester**. Το παρακάτω θεώρημα δίνει μια αναγκαία και ικανή συνθήκη για την εξίσωση του Sylvester ώστε να έχει μοναδική λύση X για κάθε C. Βασίζεται στο θεώρημα Cayley- Hamilton και στην παρατήρηση ότι αν $AX = XB$, τότε $A^2X = A(AX) = A(XB) = (AX)B = (XB)B = XB^2$, $A^3X = A(A^2X) = A(XB^2) = (AX)B^2 = XB^3$ κ.ο.κ. Καθώς A^0 είναι ο ταυτοτικός πίνακας, έχουμε ότι

$$\left(\sum_{k=0}^{m} \alpha_k A^k\right) X = \sum_{k=0}^{m} \alpha_k A^k X = \sum_{k=0}^{m} \alpha_k X B^k = X \left(\sum_{k=0}^{m} \alpha_k B^k\right).$$

Αποτυπώνουμε την παρατήρηση αυτή σε μορφή Λήμματος.

Λήμμα 4.2.2. *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$, $B \in M_m(\mathbb{C})$ και $X \in M_{n,m}(\mathbb{C})$. Αν $AX - XB = 0$, τότε $g(A)X - Xg(B) = 0$ για κάθε πολυώνυμο $g(t)$.*

Θεώρημα 4.2.2 (Sylvester)**.** *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$ και $B \in M_m(\mathbb{C})$. Η εξίσωση $AX - XB = C$ έχει μοναδική λύση $X \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ για κάθε $C \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ αν και μόνο αν $\sigma(A) \cap \sigma(B) = \varnothing$, δηλαδή, αν και μόνο αν οι A και B δεν έχουν κοινή ιδιοτιμή. Συγκεκριμένα, αν $\sigma(A) \cap \sigma(B) = \varnothing$ τότε ο μοναδικός X τέτοιος ώστε $AX - XB = 0$ είναι ο $X = 0$. Αν A και B είναι πραγματικοί, τότε $AX - XB = C$ έχει μοναδική λύση $X \in M_{n,m}(\mathbb{R})$ για κάθε $C \in M_{n,m}(\mathbb{R})$.*

Απόδειξη. Θεωρούμε τον γραμμικό μετασχηματισμό $T : M_{n,m}(\mathbb{C}) \to M_{n,m}(\mathbb{C})$ που ορίζεται από $T(X) = AX - XB$. Για να εξασφαλίσουμε ότι η εξίσωση $T(X) = C$ έχει μοναδική λύση X για κάθε $C \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ αρκεί να δείξουμε ότι η μόνη λύση του $T(X) = 0$ είναι η $X = 0$. Αν $AX - XB = 0$ ξέρουμε από το προηγούμενο λήμμα ότι $p_B(A)X - Xp_B(B) = 0$. Το θεώρημα Cayley - Hamilton μας εξασφαλίζει ότι $p_B(B) = 0$, άρα $p_B(A)X = 0$.

Έστω $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ οι ιδιοτιμές του B, άρα $p_B(t) = (t-\lambda_1)\cdots(t-\lambda_n)$ και $p_B(A) = (A - \lambda_1 I)\cdots(A - \lambda_n I)$. Αν $\sigma(A) \cap \sigma_B = \varnothing$, τότε κάθε παράγοντας $A - \lambda_j I$ είναι αντιστρέψιμος, $p_B(A)$ είναι αντιστρέψιμος, και η μόνη λύση του $p_B(A)X = 0$ είναι $X = 0$. Αντίθετα, αν το $p_B(A)X = 0$ έχει μια μη τετριμένη λύση, τότε το $p_B(A)$ πρέπει να είναι μη αντιστρέψιμος, κάποιος παράγοντας $A - \lambda_j I$ είναι μη αντιστρέψιμος και κάποια λ_j είναι ιδιοτιμή του A.

Αν οι A και B είναι πραγματικοί, θεωρούμε τον γραμμικό μετασχηματισμό $T: M_{n,m}(\mathbb{R}) \to M_{n,m}(\mathbb{R})$ που ορίζεται από $T(X) = AX - XB$. Το ίδιο επιχείρημα δείχνει ότι ο πραγματικός πίνακας $p_B(A)$ είναι αντιστρέψιμος αν και μόνο αν $\sigma(A) \cup \sigma(B) = \varnothing$ (ακόμα κι αν κάποιες από τις ιδιοτιμές λ_i του B δεν είναι πραγματικές). $\square$

4.2.5 Μοναδικότητα στο θεώρημα τριγωνοποίησης του Schur

Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$. Ένας άνω τριγωνικός πίνακας T που περιγράφεται στο Θεώρημα (4.1.1), που μπορεί να επιτευχθεί με ορθομοναδιαία ομοιότητα δεν χρειάζεται να είναι μοναδικός. Δηλαδή διαφορετικοί άνω τριγωνικοί πίνακες με τις ίδιες κύριες διαγωνίους μπορεί να είναι ορθομοναδιαία όμοιοι.

4.2.6 Κάθε τετραγωνικός πίνακας είναι σχεδόν διαγωνιοποιήσιμος

Μια άλλη χρήση του αποτελέσματος Schur είναι να καταστεί σαφές ότι κάθε τετραγωνικός μιγαδικός πίνακας είναι ¨σχεδόν διαγωνιοποιήσιμος¨, το οποίο έχει δύο ερμηνείες. Η πρώτη λέει ότι αυθαίρετα κοντά σε δοσμένο πίνακα, υπάρχει ένας διαγωνιοποιήσιμος πίνακας, ενώ η δεύτερη λέει ότι κάθε δοσμένος πίνακας είναι όμοιος με έναν άνω τριγωνικό πίνακα του οποίου τα στοιχεία, εκτός των διαγώνιων, είναι αυθαίρετα μικρά.

Θεώρημα 4.2.3. *Έστω $A = [\alpha_{ij}] \in M_n(\mathbb{C})$. Για κάθε $\epsilon > 0$, υπάρχει ένας πίνακας $A(\epsilon) = [\alpha_{ij}(\epsilon)] \in M_n(\mathbb{C})$ που έχει n διακριτές ιδιοτιμές (και επομένως είναι διαγωνιοποιήσιμος) και είναι τέτοιος ώστε $\sum_{i,j=1}^{n} |\alpha_{ij} - \alpha_{ij}(\epsilon)|^2 < \epsilon$*

Απόδειξη. Έστω $U \in M_n(\mathbb{C})$ ορθομοναδιαίος έτσι ώστε $U^*AU = T$ να είναι άνω τριγωνικός. Έστω $E = \operatorname{diag}(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n)$, όπου $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_n$ επιλέγονται έτσι ώστε $|\varepsilon_i| < (\frac{\epsilon}{n})^{\frac{1}{2}}$ και $t_{ii} + \varepsilon_i \neq t_{jj} + \varepsilon_j$ για κάθε $i \neq j$. Τότε ο $T + E$ έχει n διακριτές ιδιοτιμές: $t_{11} + \varepsilon_1, \ldots, t_{nn} + \varepsilon_n$, και το ίδιο ισχύει και για τον $A + UEU^*$, ο οποίος είναι όμοιος με τον $T + E$. Έστω $A(\epsilon) = A + UEU^*$, έτσι ώστε $A - A(\epsilon) = -UEU^*$, και το Θεώρημα 3.3.1 μας εξασφαλίζει ότι

$$\sum_{i,j=1}^{n} |\alpha_{ij} - \alpha_{ij}(\epsilon)|^2 = \sum_{i=1}^{n} |\varepsilon_i|^2 < n(\frac{\epsilon}{n}) = \epsilon.$$

$\square$

Θεώρημα 4.2.4. *Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$. Για κάθε $\epsilon > 0$ υπάρχει ένας αντιστρέψιμος πίνακας $S_\epsilon \in M_n(\mathbb{C})$ τέτοιος ώστε $S_\epsilon^{-1} A S_\epsilon = T_\epsilon = [t_{ij}(\epsilon)]$ είναι άνω τριγωνικός και $|t_{ij}(\epsilon)| \leq \epsilon$ για όλα τα $i, j \in \{1, \ldots, n\}$ έτσι ώστε $i < j$.*

Απόδειξη. Εφαρμόζουμε πρώτα το θεώρημα του Schur για να κατασκευάσουμε έναν ορθομοναδιαίο πίνακα $U \in M_n(\mathbb{C})$ και έναν άνω τριγωνικό πίνακα $T \in M_n(\mathbb{C})$ έτσι ώστε $U^*AU = T$. Ορίζουμε $D_a = \operatorname{diag}(1, a, a^2, \ldots, a^{n-1})$ για ένα μη μηδενικό βαθμωτό a και $t = \max_{i<j} |t_{ij}|$. Υποθέτουμε ότι $\epsilon < 1$, το οποίο αρκεί για την απόδειξη. Αν $t \leq 1$, έστω $S_\epsilon = UD_\epsilon$, αν $t > 1$, έστω $S_\epsilon = UD_{1/t}D_\epsilon$. Και στις δύο περιπτώσεις, το κατάλληλο S_ϵ επιβεβαιώνει τον ισχυρισμό του θεωρήματος. Αν $t \leq 1$, με υπολογισμούς παίρνουμε ότι $t_{ij}(\epsilon) = t_{ij}\epsilon^{-i}\epsilon^{j} = t_{ij}\epsilon^{j-i}$, του οποίου η απόλυτη τιμή δεν είναι περισσότερο από $j - i$, που με τη σειρά του, δεν είναι περισσότερο από ϵ αν $i < j$. Αν $t > 1$, η ομοιότητα κατά $D_{1/t}$, παράγει έναν πίνακα που όλα τα στοιχεία εκτός διαγωνίου δεν είναι περισσότερο από 1 σε απόλυτη τιμή. $\square$

4.3 Ένα Παράδειγμα Τριγωνοποίησης Schur

Παράδειγμα 4.3.1. Έστω ο πίνακας

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ -2 & -4 \end{bmatrix}.$$

Θα βρούμε έναν ορθογώνιο πίνακα U και έναν άνω τριγωνικό πίνακα T έτσι ώστε $U^T AU = T$ εφαρμόζοντας την τριγωνοποίηση Schur. Αρχικά, θα βρούμε τις ιδιοτιμές του A, που είναι ακριβώς οι λύσεις τις εξίσωσεις

$$\det(\lambda I - A) = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 - \lambda - 6 = 0.$$

Άρα οι ρίζες της τετραγωνικής εξίσωσης είναι οι ιδιοτιμες $\lambda_1 = -2, \lambda_2 = 3$. Στη συνέχεια, θα βρούμε τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές. Για κάθε ιδιοτιμή λ_i, λύνουμε το σύστημα

$$(A - \lambda_i I)X_i = 0.$$

Άρα για την $\lambda_1 = -2$ έχουμε

$$(A + 2I) = 0 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 7 & 7 \\ -2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow X_1 = (1, -1).$$

Ανάλογα έχουμε για την $\lambda_2 = 3$ το ιδιοδιάνυσμα $X_2 = (7, -2)$. Θα χρησιμοποιήσουμε τώρα την ορθοκανονικοποίηση Gram-Schmidt για να πάρουμε ένα ορθοκανονικό σύνολο ιδιοδιανυσμάτων. Θεωρούμε τα παραπάνω δύο ιδιοδιανύσματα που είναι γραμμικώς ανεξάρτητα αλλά δεν είναι ορθογώνια

$$X_1 = (1, -1)$$
$$X_2 = (7, -2)$$

Πρώτα παίρνουμε $w_1 = X_1 = (1, 1)$. Επομένως

$$w_2 = X_2 - \frac{w_1 \cdot X_2}{\|w_1\|^2} w_1$$

δηλαδή,

$$w_2 = \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2} \right)$$

και τελικά το ορθοκανονικό σύνολο είναι $\{\frac{w_1}{\|w_1\|}, \frac{w_2}{\|w_2\|}\} = \{\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{-1}{\sqrt{2}}\right), \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\}$. Άρα

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Τότε

$$T = U^T AU = \begin{bmatrix} -2 & 9 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}.$$

Είδαμε ένα απλό παράδειγμα 2×2 πίνακα για να βρούμε την τριγωνοποίηση Schur. Στην πράξη όμως, και ειδικά σε περιπτώσεις που ο πίνακας είναι μεγαλύτερος και πιο σύνθετος, δεν χρησιμοποιείται επαναλαμβανόμενα η ορθοκανονικοποίηση Gram-Schmidt για να βρεθεί η Schur τριγωνοποίηση. Αντίθετα, εφαρμόζεται ο αλγόριθμος QR όπως θα δούμε στην επόμενη ενότητα.

Κεφάλαιο 5

QR Αλγόριθμος

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε ότι μια παραγοντοποίηση Schur ενός πίνακα $A \in M_n(\mathbb{C})$ μας δίνει απευθείας τις ιδιοτιμές. Πιο συγκεκριμένα, αν μπορούμε να υπολογίσουμε τους U και T έτσι ώστε

$$A = UTU^*,$$

όπου $U^*U = 1$ και ο T είναι άνω τριγωνικός, τότε οι ιδιοτιμές του A δίνονται από τα διαγώνια στοιχεία του T.

Τώρα θα εισαγάγουμε τον αλγόριθμο QR, ο οποίος μερικές φορές ονομάζεται QR μέθοδος ή τα βήματα QR του Francis. Ο στόχος της μεθόδου είναι να υπολογίσει μια παραγοντοποίηση Schur μέσω μετασχηματισμών ομοιότητας. Είναι ένας από τους πιο σημαντικούς αλγορίθμους στους υπολογισμούς ιδιοτιμών. Ωστόσο, εφαρμόζεται μόνο σε πυκνούς (ή πλήρεις) πίνακες. Πρώτον, μέσω ενός μετασχηματισμού ομοιότητας, ο αρχικός πίνακας μετασχηματίζεται, σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων, σε μορφή Hessenberg ή στην ερμιτιανή/συμμετρική περίπτωση, σε πραγματική τριδιαγώνια μορφή. Αυτό το πρώτο στάδιο του αλγορίθμου προετοιμάζει το δεύτερο στάδιο, τις επαναλήψεις QR που εφαρμόζονται στον πίνακα Hessenberg ή στον τριδιαγώνιο πίνακα. Η συνολική πολυπλοκότητα του αλγορίθμου είναι ουσιαστικά $O(n^3)$, η οποία μπορεί να επιτευχθεί στην πράξη μόνο αφού ληφθούν κατάλληλα υπόψη αρκετές βελτιώσεις.

5.1 Ο βασικός QR αλγόριθμος

Όπως υποδηλώνει το όνομα, ο QR-αλγόριθμος είναι στενά συνδεδεμένος με την QR-παραγοντοποίηση. Θεωρούμε προς το παρόν μια QR-παραγοντοποίηση του πίνακα A,

$$A = QR$$

όπου $Q^*Q = I$ και ο R είναι άνω τριγωνικός πίνακας. Θα αντιστρέψουμε τώρα τη σειρά πολλαπλασιασμού του γινομένου των Q και R και θα απαλείψουμε το R,

$$RQ = Q^*AQ \tag{5.1}$$

Αφού ο Q^*AQ είναι ένας μετασχηματισμός ομοιότητας του A, ο RQ έχει τις ίδιες ιδιοτιμές με τον A. Θα δούμε αργότερα ότι με την επανάληψη αυτής της διαδικασίας, ο πίνακας RQ θα πλησιάζει όλο και περισσότερο σε ανώ τριγωνικό πίνακα, έτσι ώστε τελικά να μπορούμε να διαβάσουμε τις ιδιοτιμές από τη διαγώνιο.

Δηλαδή, ο QR αλγόριθμος δημιουργεί μία ακολουθία πινάκων A_k που ξεκινά με $A_0 = A$ και δίνεται από

$$A_k = R_k Q_k,$$

όπου Q_k και R_k αντιπροσωπεύουν μία παραγοντοποίηση QR του A_{k-1},

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

Υποθέτουμε ότι οι ιδιοτιμές του πίνακα είναι διακριτές ως προς το μέγεθος και ταξινομούνται ως $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$. Κάτω από ορισμένες υποθέσεις, τα στοιχεία του πίνακα A_k κάτω από τη διαγώνιο θα συγκλίνουν στο μηδέν σύμφωνα με

$$|\alpha_{ij}^{(k)}| = O(|\lambda_i/\lambda_j|^k) \quad \text{για όλα τα } i > j.$$

Από την (5.1) βλέπουμε ότι

$$A_k = Q_k^* A_{k-1} Q_k = Q_k^* Q_{k-1}^* A_{k-2} Q_{k-1} Q_k = \cdots = Q_k^* \cdots Q_1^* A_0 \underbrace{Q_1 \cdots Q_k}_{U_k}. \tag{5.2}$$

Με την ίδια υπόθεση για τις ιδιοτιμές, το A_k τείνει σε έναν άνω τριγωνικό πίνακα και το U_k συγκλίνει στον πίνακα των διανυσμάτων Schur.

Algorithm 1 Βασικός αλγόριθμος QR

Έστω $A \in M_n(\mathbb{C})$. Αυτός ο αλγόριθμος υπολογίζει έναν άνω τριγωνικό πίνακα T και έναν ορθομοναδιαίο πίνακα U έτσι ώστε $A = UTU^*$ είναι η Schur παραγοντοποίηση του A.
Θέτουμε $A_0 := A$ και $U_0 = I$.
for k = 1, 2, ... **do**
  $A_{k-1} =: Q_k R_k$; /* QR παραγοντοποίηση */
  $A_k := R_k Q_k$;
  $U_k := U_{k-1} Q_k$; /* Ενημέρωση πίνακα μετασχηματισμού */
end for
Θέτουμε $T := A_\infty$ και $U := U_\infty$.

Παράδειγμα 5.1.1. Έστω

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$$

με ιδιοτιμές $\lambda_1 = 5.3723$ και $\lambda_2 = -0.3723$ για τις οποίες ισχύει $|\lambda_1| > |\lambda_2|$. Θα εφαρμόσουμε τον Αλγόριθμο 1 για τον προσδιορισμό αυτών των ιδιοτιμών. Για $k = 0$

$$A_0 = A = Q_0 R_0$$

$$Q_0 = \begin{bmatrix} -0.3162 & -0.9487 \\ -0.9487 & 0.3162 \end{bmatrix}$$

$$R_0 = \begin{bmatrix} -3.1623 & -4.4272 \\ 0 & -0.6325 \end{bmatrix}$$

$k = 1$

$$A_1 = R_0 Q_0 = \begin{bmatrix} 5.2 & 1.6 \\ 0.6 & -0.2 \end{bmatrix} = Q_1 R_1$$

$$Q_1 = \begin{bmatrix} -0.9934 & -0.1146 \\ -0.1146 & -0.9934 \end{bmatrix}$$

$$R_1 = \begin{bmatrix} -5.2345 & -1.5665 \\ 0 & -0.3821 \end{bmatrix}$$

$k = 2$

$$A_2 = R_1 Q_1 = \begin{bmatrix} 5.3796 & -0.9562 \\ 0.0438 & -0.3796 \end{bmatrix} = Q_2 R_2$$

.

$$Q_2 = \begin{bmatrix} -1 & -0.0082 \\ -0.0081 & 1 \end{bmatrix}$$

$$R_2 = \begin{bmatrix} -5.3797 & 0.9593 \\ 0 & -0.3718 \end{bmatrix}$$

$k = 3$

$$A_3 = R_2 Q_2 = \begin{bmatrix} 5.3718 & 1.0030 \\ 0.0030 & -0.3718 \end{bmatrix} = Q_3 R_3$$

.

$$Q_3 = \begin{bmatrix} 1 & -0.0006 \\ -0.0006 & 1 \end{bmatrix}$$

$$R_3 = \begin{bmatrix} -5.3718 & -1.0028 \\ 0 & -0.3723 \end{bmatrix}$$

$k = 4$

$$A_4 = R_3 Q_3 = \begin{bmatrix} 5.3723 & -0.9998 \\ 0.0002 & -0.3723 \end{bmatrix}.$$

5.2 Μειονεκτήματα του απλού QR-αλγορίθμου

Παρόλο που ο βασικός QR-αλγόριθμος γενικά συγκλίνει σε μια παραγοντοποίηση Schur όταν το $k \to \infty$, στην πράξη όμως δεν προτείνεται. Ο βασικός QR αλγόριθμος είναι συχνά αργός, με την έννοια ότι ο αριθμός των επαναλήψεων που απαιτούνται για την επίτευξη σύγκλισης είναι γενικά υψηλός. Είναι γενικά ακριβό με την έννοια ότι η υπολογιστική προσπάθεια που απαιτείται ανά βήμα είναι υψηλή. Πιο συγκεκριμένα τα μειονεκτήματα του αλγορίθμου είναι τα εξής

Μειονέκτημα 1. Ένα βήμα του QR αλγορίθμου είναι σχετικά ακριβό. Δηλαδή, η πολυπλοκότητα ενός βήματος του αλγορίθμου είναι $O(n^3)$. Ακόμα κι αν υποθέσουμε ότι ο αριθμός των βημάτων είναι ανάλογος του n, ο αλγόριθμος θα χρειαστεί $O(n^4)$ χειρισμούς.

Μειονέκτημα 2. Συνήθως, απαιτούνται πολλά βήματα για να υπάρξει σύγκλιση, σίγουρα πολύ περισσότερα από n. Στη πραγματικότητα ο αλγόριθμος QR μπορεί να είναι πολύ αργός αν οι ιδιοτιμές είναι πολύ κοντά η μία στην άλλη. Οπότε στην πράξη είναι πολύ αργός.

Τα μειονεκτήματα της βασικής μεθόδου QR υποδηλώνουν ότι απαιτούνται αρκετές βελτιώσεις για να επιτευχθεί ένας ανταγωνιστικός αλγόριθμος. Στη συνέχεια θα βελτιώσουμε και τα δύο θέματα αυτά. Πρώτα θα βρούμε μία δομή πίνακα που διατηρείται από τον αλγόριθμο QR και που μειώνει το κόστος ενός βήματος επανάληψης. Μετά, θα βελτιώσουμε τις ιδιότητες σύγκλισης του αλγορίθμου.

5.3 Ο Hessenberg QR αλγόριθμος

Μια δομή πίνακα που είναι κοντά στην άνω τριγωνική μορφή και που διατηρείται από τον αλγόριθμο QR είναι η μορφή Hessenberg. Ο πίνακας Hessenberg είναι καίριας σημασίας για αυτές τις βελτιώσεις.

Θεώρημα 5.3.1. *Η μορφή Hessenberg διατηρείται από τον αλγόριθμο QR.*

Απόδειξη. Θα δείξουμε ότι αν πάρουμε έναν Hessenberg πίνακα H με QR παραγοντοποίηση $H = QR$, τότε ο $\bar{H} = RQ$ είναι ξανά ένας Hessenberg πίνακας.

Αν πολλαπλασιάσουμε πρώτα τον H με μια περιστροφή Givens $G(i, j, \theta)$, ισοδυναμεί με αριστερόστροφη περιστροφή κατά ακτίνα θ στο επίπεδο συντεταγμένων (i, j). Προφανώς, μια περιστροφή Givens είναι ένας ορθογώνιος πίνακας. Αν $x \in \mathbb{R}^n$ και $y = G(i, j, \theta)^* x$, τότε

$$y_k = \begin{cases} cx_i - sx_j, & k = i \\ sx_i + cx_j, & k = j \\ x_k, & k \neq i, j \end{cases}$$

Μπορούμε να μηδενίσουμε το y_j θέτοντας

$$c = \frac{x_i}{\sqrt{|x_i|^2 + |x_j|^2}}, \quad s = \frac{-x_j}{\sqrt{|x_i|^2 + |x_j|^2}}. \tag{5.3}$$

Έτσι, είναι απλό να μηδενίσουμε ένα συγκεκριμένο στοιχείο σε ένα διάνυσμα χρησιμοποιώντας μια περιστροφή Givens.

Τώρα, θα δούμε έναν πίνακα Hessenberg H. Θα δείξουμε την βασική διαδικασία μέσω ενός παραδείγματος 4×4.

$$H = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{G(1,2,\theta_1)^* \cdot} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{G(2,3,\theta_2)^* \cdot} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{G(3,4,\theta_3)^* \cdot} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix} = R$$

Άρα, με $G_k = G(k, k+1, \theta_k)$, παίρνουμε

$$\underbrace{G_3^* G_2^* G_1^*}_{Q^*} H = R \Longleftrightarrow H = QR.$$

Ο πολλαπλασιασμός των Q και R με αντίστροφη σειρά δίνει

$$\bar{H} = RQ = RG_1 G_2 G_3,$$

ή, αλλιώς

$$R = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\cdot G(1,2,\theta_1)} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$
$$\xrightarrow{\cdot G(2,3,\theta_2)} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\cdot G(3,4,\theta_3)} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix} = \bar{H}.$$

Γενικότερα, αν ο H είναι $n \times n$, οι $n-1$ περιστροφές Givens $G_1, \ldots, G_{n-1}$ χρειάζονται για να μετατραπεί ο H σε άνω τριγωνική μορφή. Η εφαρμογή των περιστροφών από τα δεξιά επαναφέρει τη μορφή Hessenberg. □

Σχόλιο. Το μη μηδενικό μοτίβο Hessenberg δεν είναι το μόνο μοτίβο που διατηρείται από τον αλγόριθμο QR, είναι όμως το πιο απλό.

5.3.1 Πολυπλοκότητα

Δίνουμε τον αλγόριθμο για ένα μεμονωμένο βήμα Hessenberg-QR, (Αλγόριθμος 2). Με

$$H_{k:j,m:n} \in C^{(j-k+1)\times(n-m+1)}$$

συμβολίζουμε τον υποπίνακα του H που αποτελείται από σειρές k έως j και στήλες m έως n.

Algorithm 2 Ένα βήμα QR Hessenberg

1: Έστω $H \in M_n(\mathbb{C})$ ένας άνω Hessenberg πίνακας. Αυτός ο αλγόριθμος αντικαθιστά τον H με $\bar{H} = RQ$, όπου $H = QR$ είναι μια QR παραγοντοποίηση του H.
2: **for** $k = 1, 2, \ldots, n-1$ **do**
3: /* Δημιουργούμε G_k και στην συνέχεια τον εφαρμόζουμε: $H = G(k, k+1, \theta_k)^* H$ */
4: $[c_k, s_k] :=$ **givens**$(H_{k,k}, H_{k+1,k})$;
5: $H_{k:k+1,k:n} = \begin{bmatrix} c_k & -s_k \\ s_k & c_k \end{bmatrix} H_{k:k+1,k:n}$;
6: **end for**
7: **for** $k = 1, 2, \ldots, n-1$ **do**
8: /* Εφαρμόζουμε τις περιστροφές G_k από δεξιά */
9: $H_{1:k+1,k:k+1} = H_{1:k+1,k:k+1} \begin{bmatrix} c_k & s_k \\ -s_k & c_k \end{bmatrix}$;
10: **end for**

Αν παραμελήσουμε τον προσδιορισμό των παραμέτρων c_k και s_k (5.3), τότε καθένας από τους δύο βρόχους απαιτεί

$$\sum_{i=1}^{n-1} 6i = 6\frac{n(n-1)}{2} \approx 3n^2 \quad \text{πράξεις.}$$

Προαιρετικά, πρέπει επίσης να εκτελέσουμε την πράξη $U_k := U_{k-1}Q_k$ του Αλγορίθμου 1. Αυτό επιτυγχάνεται με έναν βρόχο παρόμοιο με τον δεύτερο βρόχο στον Αλγόριθμο 2.

---

for $k = 1, 2, \ldots, n-1$ **do**
  $U_{1:n,k:k+1} = U_{1:n,k:k+1} \begin{bmatrix} c_k & s_k \\ -s_k & c_k \end{bmatrix}$;
end for

Αφού εμπλέκονται όλες οι σειρές και οι στήλες του U το κόστος εκτέλεσης του βρόχου είναι

$$\sum_{i=1}^{n-1} 6n \approx 6n^2 \quad \text{πράξεις.}$$

Συνολικά, ένα βήμα QR με πίνακα Hessenberg, συμπεριλαμβανομένης της ενημέρωσης του ορθομαναδιαιου πίνακα μετασχηματισμού, απαιτεί πράξεις κινητής υποδιαστολής $12n^2$. Αυτό πρέπει να οριστεί σε σχέση με ένα βήμα QR με έναν πλήρη πίνακα που κοστίζει $\frac{7}{3}n^3$. Συνεπώς, έχουμε κερδίσει συντελεστή $O(n)$ ως προς τις πράξεις μεταβαίνοντας από την πυκνή στη μορφή Hessenberg. Ωστόσο, μπορεί να έχουμε πολύ αργή σύγκλιση εάν ένα από τα πηλίκα $|\lambda_k|/|\lambda_{k+1}|$ είναι κοντά στο 1.

Παράδειγμα 5.3.1. Εφαρμόζοντας τον Αλγόριθμο 2 στον πίνακα

$$H = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 3 \\ 0 & .01 & 1 \end{bmatrix},$$

τότε

$$G_1 = \begin{bmatrix} .6 & -.8 & 0 \\ .8 & .6 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad G_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & .9996 & -.0249 \\ 0 & .0249 & .9996 \end{bmatrix},$$

και

$$R = G_2^* G_1^* H = \begin{bmatrix} 5 & 2.2 & 3.6 \\ 0 & .40008 & .22482 \\ 0 & .00003 & .99462 \end{bmatrix}, \quad Q = G_1 G_2 = \begin{bmatrix} .6 & -.79968 & .01992 \\ .8 & .59976 & -.01494 \\ 0 & .02490 & .9996 \end{bmatrix}$$

και

$$\bar{H} = RQ = \begin{bmatrix} 4.7600 & -2.5442 & 5.4653 \\ .3200 & .1856 & -2.1796 \\ .0000 & .0263 & 1.0540 \end{bmatrix}.$$

5.4 Αναγωγή Householder πίνακα σε Hessenberg μορφή

Στην προηγούμενη ενότητα είδαμε ότι είναι καλή ιδέα να εκτελέσουμε τον αλγόριθμο QR με πίνακες Hessenberg αντί για πλήρεις πίνακες. Αλλά δεν έχουμε συζητήσει πώς μετατρέπουμε έναν πλήρη πίνακα (μέσω μετασχηματισμών ομοιότητας) σε μορφή Hessenberg. Ασχολούμαστε με το θέμα αυτό στην ενότητα αυτή.

Οι περιστροφές Givens έχουν σχεδιαστεί για να μηδενίζουν ένα μεμονωμένο στοιχείο σε ένα διάνυσμα. Οι ανακλαστές Householder είναι πιο αποτελεσματικές αν ένας αριθμός στοιχείων ενός διανύσματος πρόκειται να μηδενιστεί ταυτόχρονα. Στη συνέχεια θα χρησιμοποιήσουμε την έννοια των ανακλαστών Householder.

5.4.1 Ανακλαστές Householder που ικανοποιούν $P_w x = ae_1$

Στο κεφάλαιο 3 δώσαμε τον ορισμό του πίνακα Householder και είδαμε κάποιες από τις ιδιότητές του. Εδώ θα αναφέρουμε μία ακόμα ιδιότητα του πίνακα Householder η οποία θα μας φανεί χρήσιμη στην ενότητα αυτή:

Δεδομένου ενός $w \in \mathbb{C}^n$, ο αντίστοιχος ανακλαστής Householder μπορεί να πολλαπλασιαστεί με ένα διάνυσμα με $O(n)$ πράξεις:

$$P_w x = x - 2w(w^* x). \tag{5.4}$$

Μια εργασία που επανειλημμένα θέλουμε να εκτελέσουμε με τους ανακλαστές Householder είναι να μετατρέψουμε ένα διάνυσμα x σε ένα πολλαπλάσιο του e_1,

Λήμμα 5.4.1. *Υποθέτουμε $x \in \mathbb{R}^m \setminus \{0\}$, $\rho = \pm 1$ και $a := \rho\|x\|$. Έστω,*

$$w = \frac{x - ae_1}{\|x - ae_1\|} = \frac{z}{\|z\|},$$

όπου

$$z := x - ae_1 = \begin{bmatrix} x_1 - \rho\|x\| \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

Τότε, ο πίνακας $P_w = I - 2ww^T$ είναι ένας ανακλαστήρας Householder και

$$P_w x = ae_1.$$

Απόδειξη. Ο πίνακας P_w είναι ένας ανακλαστής Householder αφού το w είναι κανονικοποιημένο. Από τον ορισμό του z και a έχουμε $z^T z = (x - ae_1)^T (x - ae_1) = 2(\|x\|^2 - \rho\|x\|x_1)$. Όμοια, $z^T x = \|x\|^2 - \rho\|x\|x_1$. Άρα

$$ww^T x = \frac{z}{\|z\|}\frac{z^T}{\|z\|}x = \frac{z^T x}{z^T z}z = \frac{1}{2}$$

και $(I - 2ww^T)x = x - z = ae_1$. □

Το ρ μπορεί να επιλεγεί ελεύθερα (υπό την προϋπόθεση ότι $\|\rho\| = 1$. Η επιλογή $\rho = -\mathrm{sign}(x_1)$, είναι συχνά καλύτερη από την άποψη των σφαλμάτων στρογγυλοποίησης. Με αυτή τη συγκεκριμένη επιλογή του ρ, το Λήμμα 5.4.1 ισχύει και στη μιγαδική αριθμητική.

5.4.2 Αναγωγή σε μορφή Hessenberg

Θα δείξουμε τώρα πώς να χρησιμοποιούμε ανακλαστές Householder για να μειώσουμε έναν αυθαίρετο τετραγωνικό πίνακα σε μορφή Hessenberg. Θα δείξουμε την ιδέα με ένα παράδειγμα πίνακα 5×5. Στο πρώτο βήμα της αναγωγής εισάγουμε μηδενικά στην πρώτη στήλη κάτω από το δεύτερο στοιχείο,

$$A = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{P_{w_1}\cdot} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\cdot P_{w_1}} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} = P_{w_1}^* A P_{w_1}.$$

Παρατηρούμε ότι $P_{w_1} = P_{w_1}^*$ αφού είναι ένας ανακλαστήρας Householder. Έχει τη δομή

$$P_{w_1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & I_4 - 2w_1w_1^* \end{bmatrix}.$$

Το διάνυσμα Householder w_1 ορίζεται έτσι ώστε

$$(I - 2w_1w_1^*) \begin{bmatrix} a_{21} \\ a_{31} \\ a_{41} \\ a_{51} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = ae_1 \quad \text{με } w_1 = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{bmatrix}.$$

Ο πολλαπλασιασμός του P_{w_1} από τα αριστερά εισάγει τα επιθυμητά μηδενικά στη στήλη 1 του A. Ο πολλαπλασιασμός από τα δεξιά είναι απαραίτητος για να υπάρχει ομοιότητα. Λόγω της μη μηδενικής δομής του P_{w_1}, η πρώτη στήλη του $P_{w_1}A$ δεν επηρεάστηκε. Επομένως, τα μηδενικά παραμένουν εκεί.

Η μείωση συνεχίζεται με τον ίδιο τρόπο:

$$P_{w_1}AP_{w_1} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{P_{w_2}\cdot / \cdot P_{w_2}} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\cdot P_{w_3}\cdot / \cdot P_{w_3}} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix} = P_{w_3}P_{w_2}P_{w_1}A\underbrace{P_{w_1}P_{w_2}P_{w_3}}_{U}.$$

Ο αλγόριθμος 3 δίνει τις λεπτομέρειες για τη γενική περίπτωση $n \times n$. Στο βήμα 4 αυτού του αλγορίθμου, ο ανακλαστής Householder δημιουργείται έτσι ώστε

$$(I - 2w_kw_k^*) \begin{bmatrix} a_{k+1,k} \\ a_{k+2,k} \\ \vdots \\ a_{n,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{με } w_k = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_{n-k} \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad |\alpha| = \|x\|.$$

Τα διανύσματα Householder αποθηκεύονται στις θέσεις των μηδενικών. Επομένως, ο πίνακας $U = P_{w_1} \cdots P_{w_{n-2}}$ που επηρεάζει τον μετασχηματισμό ομοιότητας από τον πλήρες A στον Hessenberg H υπολογίζεται αφού δημιουργηθούν όλα τα διανύσματα Householder, εξοικονομώντας έτσι $(\frac{2}{3})n^3$ πράξεις. Η συνολική πολυπλοκότητα της μείωσης είναι

- Εφαρμογή του P_{w_k} από αριστερά: $\sum_{k=1}^{n-2} 4(n-k-1)(n-k) \approx \frac{4}{3}n^3$
- Εφαρμογή του P_{w_k} από δεξιά: $\sum_{k=1}^{n-2} 4(n)(n-k) \approx 2n^3$
- Μορφή $U = P_{w_1} \cdots P_{w_{n-2}} : \sum_{k=1}^{n-2} 4(n-k)(n-k) \approx \frac{4}{3}n^3$

Έτσι, η αναγωγή σε μορφή Hessenberg κοστίζει $\frac{10}{3}n^3$ πράξεις χωρίς να σχηματιστεί ο πίνακας μετασχηματισμού και $\frac{14}{3}n^3$ συμπεριλαμβανομένου του σχηματισμού αυτού του πίνακα.

Algorithm 3 Αναγωγή σε μορφή Hessenberg

```
Αυτός ο αλγόριθμος ανάγει έναν πίνακα A ∈ M_n(C) σε μορφή Hessenberg H από
  μια ακολουθία από ανακλαστές Householder. H αντικαθιστά A.
for k = 1 to n − 2 do
    Δημιουργούμε τον ανακλαστή Householder P_{w_k};
    /* Εφαρμόζουμε P_{w_k} = I_k ⊕ (I_n − k − 2 w_k w_k^*) από αριστερά του A */
    A_{k+1:n,k:n} := A_{k+1:n,k:n} − 2 w_k (w_k^* A_{k+1:n,k:n});
    /* Εφαρμόζουμε P_{w_k} από δεξιά, A := A P_{w_k} */
    A_{1:n,k+1:n} := A_{1:n,k+1:n} − 2 (A_{1:n,k+1:n} w_k) w_k^*/;
end for
if τα ιδιοδιανύσματα είναι σε επιθυμητή μορφή U = P_{w_1} ··· P_{w_{n−2}} then
    U := I_n;
    for k = n − 2 μέχρι 1 do
        /* Ενημερώνουμε U := P_{w_k} U */
        U_{k+1:n,k+1:n} := U_{k+1:n,k+1:n} − 2 w_k (w_k^* U_{k+1:n,k+1:n});
    end for
end if
```

Παράδειγμα 5.4.1. Θα μετασχηματίσουμε τον πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

σε άνω Hessenberg μορφή και θα προσδιορίσουμε τον πίνακα P_w.

Απαιτείται ένα μόνο βήμα. Διαμορφώνουμε τον $\hat{P}_{w_1}$ έτσι ώστε

$$\hat{P}_{w_1} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$w_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \sqrt{2} e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \sqrt{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+\sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{P}_{w_1} = I_2 - \frac{2 w_2 w_2^T}{w_2^T w_2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - 0.2929 \begin{bmatrix} 5.8284 & 2.4142 \\ 2.4142 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.7071 & -0.7071 \\ -0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}.$$

Διαμορφώνουμε τον P_1

$$P_{w_1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & & \\ 0 & \hat{P}_{w_1} & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7071 & -7071 \\ 0 & -0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}$$

$$A = A^{(1)} = P_{w_1} A P_{w_1}^T = \begin{bmatrix} 0 & -2.1213 & 0.7071 \\ -1.4142 & 3.500 & -0.5000 \\ 0 & 1.5000 & -0.5000 \end{bmatrix} = H_w.$$

Παράδειγμα 5.4.2. Αν

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 7 \\ 3 & 0 & 6 \\ 4 & 3 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & .6 & .8 \\ 0 & .8 & -.6 \end{bmatrix}$$

τότε

$$U^T A U = H_w = \begin{bmatrix} 1.00 & 8.60 & -.20 \\ 5.00 & 4.96 & -.72 \\ 0.00 & 2.28 & -3.96 \end{bmatrix}.$$

όπου U είναι το γινόμενο των Householder πινάκων, στην περίπτωσή μας $U = P_{w_1}$.

5.5 Βελτίωση της σύγκλισης του αλγορίθμου QR

Είδαμε πως ο αλγόριθμος QR για τον υπολογισμό της μορφής Schur ενός πίνακα A μπορεί να εκτελεστεί πιο οικονομικά εάν ο πίνακας A μετατραπεί πρώτα σε μορφή Hessenberg. Τώρα θέλουμε να δείξουμε πώς η σύγκλιση του αλγόριθμου QR Hessenberg μπορεί να βελτιωθεί δραματικά με την εισαγωγή στον αλγόριθμο **(φασματικών) μετατοπίσεων ((spectral) shifts)**. Μια τέτοια μετατόπιση είναι μια προσέγγιση για τον υπολογισμό ενός ιδιοζεύγους του οποίου η ιδιοτιμή είναι κοντά σε μια συγκεκριμένη τιμή.

Λήμμα 5.5.1. *Έστω H ένας unreduced Hessenberg πίνακας. Έστω $H = QR$ η QR παραγοντοποίηση του H. Τότε για τα διαγώνια στοιχεία του R έχουμε*

$$|r_{kk}| > 0, \quad \text{για κάθε} k < n.$$

Έτσι, αν ο H είναι μη αντιστρέψιμος τότε $r_{nn} = 0$.

Απόδειξη. Θα δούμε το k-ο βήμα της παραγοντοποίησης Hessenberg QR. Για παράδειγμα, θα εξετάσουμε την περίπτωση $k = 3$ σε έναν 5×5 πίνακα, που έχει δομή

$$\begin{bmatrix} + & + & + & + & + \\ 0 & + & + & + & + \\ 0 & 0 & + & + & + \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times \end{bmatrix}.$$

Τα σύμβολα + υποδηλώνουν στοιχεία που έχουν τροποποιηθεί. Στο βήμα 3, το (μη μηδενικό) στοιχείο h_{43} θα μηδενιστεί από μια περιστροφή Givens $G(3,4,\varphi)$ που καθορίζεται έτσι ώστε

$$\begin{bmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{h}_{kk} \\ h_{k+1,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{kk} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Επειδή η περιστροφή Givens διατηρεί τα διανυσματικά μήκη, έχουμε

$$|r_{kk}|^2 = |\tilde{h}_{kk}|^2 + |h_{k+1,k}|^2 \geq |h_{k+1,k}|^2 > 0,$$

που επιβεβαιώνει τον ισχυρισμό. □

Εφαρμόζουμε το Λήμμα 5.5.1 για να επιταχύνουμε τη σύγκλιση του αλγορίθμου QR.

Έστω λ μια ιδιοτιμή του unreduced Hessenberg πίνακα H. Ας ελέγξουμε τι συμβαίνει με την εκτέλεση

1: $H - \lambda I = QR$ /* QR παραγοντοποίηση */
2: $\bar{H} = RQ + \lambda I$

Πρώτα παρατηρούμε ότι $\bar{H} \sim H$. Στην πραγματικότητα,

$$\bar{H} = Q^*(H - \lambda I)Q + \lambda I = Q^* H Q.$$

Δεύτερον, από το Λήμμα 5.5.1 έχουμε

$$H - \lambda I = QR, \quad \text{με} \quad R = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Έτσι,

$$RQ = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

και

$$\bar{H} = RQ + \lambda I = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & 0 & \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{H}_1 & \mathbf{h_1} \\ \mathbf{0}^T & \lambda \end{bmatrix}.$$

Έτσι, αν εφαρμόσουμε ένα βήμα QR με **τέλεια μετατοπιση (perfect shift)** σε έναν πίνακα Hessenberg, η ιδιοτιμή βγαίνει εκτός. Τότε θα μπορούσαμε να υποτιμήσουμε (deflate), δηλαδή να συνεχίσουμε τον αλγόριθμο με τον μικρότερο πίνακα $\bar{H}_1$.

Σχόλιο. Θα μπορούσαμε να αποδείξουμε την ύπαρξη της Schur παραγοντοποίησης με τον ακόλουθο τρόπο:

- Μετατρέπουμε τον αυθαίρετο πίνακα σε μορφή Hessenberg.
- Κάνουμε την τέλεια μετατόπιση Hessenberg QR με τις ιδιοτιμές που γνωρίζουμε ότι υπάρχουν η μία μετά την άλλη.

5.6 Αλγόριθμος QR με μετατοπίσεις

Αυτές οι μελέτες δείχνουν ότι μπορεί να είναι καλό να εισαχθούν μετατοπίσεις στον αλγόριθμο QR. Ωστόσο, δεν μπορούμε να επιλέξουμε τέλειες μετατοπίσεις επειδή δεν γνωρίζουμε τις ιδιοτιμές του πίνακα. Χρειαζόμαστε λοιπόν ευρετικές μεθόδους εκτίμησης των ιδιοτιμών. Μια τέτοια ευρετική είναι η **μετατόπιση του πηλίκου Rayleigh (Rayleigh quotient shift)**: Ορίζουμε τη μετατόπιση σ_k στο k-ο βήμα του αλγορίθμου QR ίση με το τελευταίο διαγώνιο στοιχείο:

$$\sigma_k := h_{n,n}^{(k-1)} = e_n^* H^{(k-1)} e_n. \tag{5.5}$$

Algorithm 4 Ο αλγόριθμος Hessenberg QR με μετατόπιση πηλίκου Rayleigh

Έστω $H_0 = H \in M_n(\mathbb{C})$ είναι ένας άνω Hessenberg πίνακας. Αυτός ο αλγόριθμος υπολογίζει την κανονική του μορφή Schur $H = UTU^*$.
$k := 0$;
for $m = n, n-1, \ldots, 2$ **do**
  repeat
    $k := k + 1$;
    $\sigma_k := h_{m,m}^{(k-1)}$;
    $H_{k-1} - \sigma_k I =: Q_k R_k$;
    $\bar{H}_k := R_k Q_k + \sigma_k I$;
    $U_k := U_{k-1} Q_k$;
  until $|h_{m,m-1}^{(k)}|$ είναι αρκετά μικρό
end for
$T := H_k$;

Ο Αλγόριθμος 4 υλοποιεί αυτήν την ευρετική. Παρατηρούμε ότι η μετατόπιση αλλάζει σε κάθε επαναληπτικό βήμα. Σημειώνουμε επίσης ότι η υποτίμηση (deflation) ενσωματώνεται στον Αλγόριθμο 4. Μόλις το τελευταίο κατώτερο στοιχείο εκτός διαγωνίου είναι αρκετά μικρό, δηλώνεται μηδέν και ο αλγόριθμος προχωρά με έναν μικρότερο πίνακα. Στον Αλγόριθμο 4 το ‘ενεργό τμήμα’ του πίνακα είναι $m \times m$.

Το Λήμμα 5.5.1 μας επιβεβαιώνει ότι στον πίνακα Hessenberg H παράγεται στη θέση $(n, n-1)$ ένα μηδέν, αν η μετατόπιση ισούται με μια ιδιοτιμή του H. Τι συμβαίνει, αν το $h_{n,n}$ είναι μια καλή προσέγγιση σε μια ιδιοτιμή του H; Ας υποθέσουμε ότι έχουμε έναν unreduced Hessenberg πίνακα

$$\begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon & h_{n,n} \end{bmatrix},$$

όπου ε είναι μια μικρή ποσότητα. Αν εφαρμόσουμε ένα βήμα μετατόπισης Hessenberg QR, πρέπει πρώτα να παραγοντοποιήσουμε $H - h_{n,n} I, QR = H - h_{n,n} I$. Μετά από $n-2$

βήματα αυτής της παραγοντοποίησης, ο παράγοντας R είναι σχεδόν άνω τριγωνικός,

$$\begin{bmatrix} + & + & + & + & + \\ 0 & + & + & + & + \\ 0 & 0 & + & + & + \\ 0 & 0 & 0 & a & \beta \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 \end{bmatrix}.$$

Από την (5.3) βλέπουμε ότι η τελευταία περιστροφή Givens έχει τα μη τετριμμένα στοιχεία

$$c_{n-1} = \frac{a}{\sqrt{|a|^2 + |\varepsilon|^2}}, \qquad s_{n-1} = \frac{-\varepsilon}{\sqrt{|a|^2 + |\varepsilon|^2}}.$$

Εφαρμόζοντας τις περιστροφές Givens από δεξιά, βλέπουμε ότι το τελευταίο χαμηλότερο στοιχείο εκτός διαγωνίου του $\bar{H} = RQ + h_{n,n}I$ γίνεται

$$\bar{h}_{n,n-1} = -\frac{\varepsilon^2 \beta}{a^2 + \varepsilon^2}. \tag{5.6}$$

Άρα, έχουμε τετραγωνική σύγκλιση εκτός αν το a είναι επίσης πολύ μικρό.

Παράδειγμα 5.6.1. Εφαρμόζοντας τον Αλγόριθμο 4 στον πίνακα

$$H = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 3 \\ 0 & 0.01 & 1 \end{bmatrix}$$

του Παραδείγματος 5.3.1, και $QR = H - 1I$ είναι η QR παραγοντοποίηση με

$$R = G_2^* G_1^* H = \begin{bmatrix} 4.4721 & 1.3416 & 3.5777 \\ 0 & .4473 & .4470 \\ 0 & .0000 & .0099 \end{bmatrix}, Q = G_1 G_2 = \begin{bmatrix} 0.4472 & .8921 & .0199 \\ 0.8944 & -.446 & -.0099 \\ 0 & .0223 & -.9975 \end{bmatrix},$$

τότε ο $\bar{H} = RQ + 1I$ δίνεται από

$$\bar{H} = \begin{bmatrix} 3.1992 & 3.4788 & -3.500 \\ 0.4000 & -0.1899 & -0.4513 \\ 0 & 0.0002 & -0.0099 \end{bmatrix}.$$

Παράδειγμα 5.6.2. Αν

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 0 & 0.01 & 7 \end{bmatrix}$$

και $QR = H - 7I$ είναι η QR παραγοντοποίηση, τότε ο $\bar{H} = RQ + 7I$ δίνεται από

$$\bar{H} \approx \begin{bmatrix} -0.5384 & 1.6908 & 0.8351 \\ 0.3076 & 6.5264 & -6.6555 \\ 0.0000 & 2 \cdot 10^{-5} & 7.0119 \end{bmatrix}.$$

Μια δεύτερη ακόμη πιο συχνά χρησιμοποιούμενη στρατηγική μετατόπισης είναι η μετατόπιση Wilkinson:

$$\sigma_k := \text{ ιδιοτιμές του } \begin{bmatrix} h_{n-1,n-1}^{(k-1)} & h_{n-1,n}^{(k-1)} \\ h_{n,n-1}^{(k-1)} & h_{n,n}^{(k-1)} \end{bmatrix} \text{ που είναι πιο κοντά στο } h_{n,n}^{(k-1)}. \tag{5.7}$$

5.7 Ο αλγόριθμος QR διπλής μετατόπισης

Ο αλγόριθμος μετατόπισης Hessenberg QR δεν λειτουργεί πάντα τόσο καλά. Αν το a στην (5.6) είναι $O(\varepsilon)$ τότε το $h_{n,n-1}$ είναι μεγάλο. (Ένα μικρό a υποδεικνύει έναν σχεδόν μοναδικό H.)

Ένα άλλο πρόβλημα προκύπτει αν οι πραγματικοί πίνακες Hessenberg έχουν μιγαδικές ιδιοτιμές. Γνωρίζουμε ότι για λογικούς ρυθμούς σύγκλισης οι μετατοπίσεις πρέπει να είναι μιγαδικές. Αν έχει βρεθεί μια ιδιοτιμή λ, μπορούμε να εκτελέσουμε μια τέλεια μετατόπιση με το $\bar{\lambda}$. Είναι απίθανο (για σφάλματα στρογγυλοποίησης) ωστόσο να επιστρέψουμε σε έναν πραγματικό πίνακα.

Αφού οι ιδιοτιμές έρχονται σε μιγαδικά συζυγή ζεύγη, είναι φυσικό να αναζητήσουμε αμέσως ένα ζεύγος ιδιοτιμών. Αυτό γίνεται με τη σύμπτυξη δύο βημάτων μετατοπίσεων QR σε ένα διπλό βήμα με τις δύο μετατοπίσεις να είναι μιγαδικές συζυγείς μεταξύ τους.

Έστω σ_1 και σ_2 δύο ιδιοτιμές πραγματικού πίνακα (μετατόπισης Wilkinson (5.7))

$$G = \begin{bmatrix} h_{n-1,n-1}^{(k-1)} & h_{n-1,n}^{(k-1)} \\ h_{n,n-1}^{(k-1)} & h_{n,n}^{(k-1)} \end{bmatrix} \in M_2(\mathbb{R}).$$

Αν $\sigma_1 \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ τότε $\sigma_2 = \bar{\sigma}_1$. Θα εκτελέσουμε δύο βήματα QR χρησιμοποιώντας τα σ_1 και σ_2 ως μετατοπίσεις. Θέτουμε $k = 1$ για ευκολία και παίρνουμε

$$\begin{aligned} H_0 - \sigma_1 I &= Q_1 R_1, \\ H_1 &= R_1 Q_1 + \sigma_1 I, \\ H_1 - \sigma_2 I &= Q_2 R_2, \\ H_2 &= R_2 Q_2 + \sigma_2 I. \end{aligned} \tag{5.8}$$

Από την δεύτερη και τρίτη εξίσωση στην (5.8) παίρνουμε

$$R_1 Q_1 + (\sigma_1 - \sigma_2) I = Q_2 R_2.$$

Πολλαπλασιάζοντας αυτή την εξίσωση με Q_1 από αριστερά και με R_1 από δεξιά παίρνουμε

$$\begin{aligned} Q_1 R_1 Q_1 R_1 + (\sigma_1 - \sigma_2) Q_1 R_1 &= Q_1 R_1 (Q_1 R_1 + (\sigma_1 - \sigma_2) I) \\ &= (H_0 - \sigma_1 I)(H_0 - \sigma_2 I) = Q_1 Q_2 R_2 R_1. \end{aligned}$$

Επειδή $\sigma_2 = \bar{\sigma}_1$ έχουμε

$$M := (H_0 - \sigma_1 I)(H_0 - \bar{\sigma}_1 I) = H_0^2 - 2\mathrm{P\varepsilon}(\sigma) H_0 + |\sigma|^2 I = Q_1 Q_2 R_2 R_1.$$

Επομένως, ο $(Q_1 Q_2)(R_2 R_1)$ είναι η QR παραγοντοποίηση ενός πραγματικού πίνακα. Μπορούμε να επιλέξουμε Q_1 και Q_2 έτσι ώστε $Z := Q_1 Q_2$ είναι πραγματικός ορθογώνιος. Τότε και ο $R_2 R_1$ είναι πραγματικός. Συνεπώς,

$$H_2 = (Q_1 Q_2)^* H_0 (Q_1 Q_2) = Z^T H_0 Z$$

είναι πραγματικός.

Μια διαδικασία για τον υπολογισμό του H_2 αποφεύγοντας τη μιγαδική αριθμητική θα μπορούσε να αποτελείται από τρία βήματα:

1. Σχηματίζουμε τον πραγματικό πίνακα $M = H_0^2 - sH_0 + tI$ με $s = 2\mathrm{Re}(\sigma) = \mathrm{trace}(G) = h_{n-1,n-1}^{(k-1)} + h_{n,n}^{(k-1)}$ και $t = |\sigma|^2 = \det(G) = h_{n-1,n-1}^{(k-1)} h_{n,n}^{(k-1)} - h_{n-1,n}^{(k-1)} h_{n,n-1}^{(k-1)}$. Παρατηρούμε ότι ο M έχει δύο χαμηλότερες διαγώνιους, για παράδειγμα σε έναν 5×5 έχουμε
$$M = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \end{bmatrix}.$$

2. Υπολογίζουμε την QR παραγοντοποίηση $M = ZR$,

3. Θέτουμε $H_2 = Z^T H_0 Z$.

Αυτή η διαδικασία είναι ωστόσο πολύ δαπανηρή αφού το στοιχείο 1, δηλ., ο σχηματισμός του H_2 απαιτεί $O(n^3)$ πράξεις.

Για να διορθώσουμε το πρόβλημα αυτό χρησιμοποιούμε το έμμεσο (implicit) Q θεώρημα.

Θεώρημα 5.7.1 (Το έμμεσο (implicit) Q θεώρημα). *Έστω $A \in M_n(\mathbb{R})$. Έστω $Q = [q_1, \dots, q_n]$ και $V = [v_1, \dots, v_n]$ ορθογώνιοι πίνακες που και οι δύο μετασχηματίζουν ομοίως τον A σε μορφή Hessenberg, $H = Q^T AQ$ και $G = V^T AV$. Έστω k συμβολίζει τον μικρότερο θετικό ακέραιο για τον οποίο $h_{k+1,k} = 0$, με $k = n$ αν ο H είναι unreduced.*

Αν $q_1 = v_1$ τότε $q_i = \pm v_i$ και $|h_{i,i-1}| = |g - i, i-1|$ για $i = 2, \dots, k$. Αν $k < n$, τότε $g_{k+1,k} = 0$.

Απόδειξη. Έστω $GW = V^T Q$. Προφανώς, ο W είναι ορθογώνιος και $GW = WH$.

Πρώτα θα δείξουμε ότι οι πρώτες k στήλες του W σχηματίζουν έναν άνω τριγωνικό πίνακα, δηλαδή
$$w_i = We_i \in \mathrm{span}\{e_1, \dots, e_i\}, \quad i \le k. \tag{5.9}$$
(Παρατηρούμε ότι οι ορθογώνιοι άνω τριγωνικοί πίνακες είναι διαγώνιοι με διαγώνια στοιχεία ± 1.) Θα το δείξουμε επαγωγικά. Για $i = 1$ έχουμε $w_1 = e_1$ με την υπόθεση ότι $q_1 = v_1$. Για $1 < i \le k$ υποθέτουμε ότι (5.9) αληθεύει για w_i και χρησιμοποιούμε την ισότητα $GW = WH$. Η $(i-1)$ στήλη αυτής της εξίσωσης είναι
$$Gw_{i-1} = GWe_{i-1} = WHe_{i-1} = \sum_{j=1}^{i} w_j h_{j,i-1}.$$

Αφού $h_{i,i-1} \neq 0$ έχουμε
$$w_i h_{i,i-1} = Gw_{i-1} - \sum_{j=1}^{i-1} w_j h_{j,i-1} \in \mathrm{span}\{e_1, \dots, e_i\},$$
καθώς ο G είναι ένας Hessenberg πίνακας. Άρα, το άνω αριστερό $k \times k$ μπλοκ του W είναι άνω τριγωνικό. Αφού οι στήλες του W είναι ορθογώνιες συμπεραίνουμε ότι $w_i = \pm e_1, i \le k$.

Αφού $w_i = \pm V^T Q e_i = V^T q_i = \pm e_i$ βλέπουμε ότι το q_i είναι ορθογώνιο σε όλες τις στήλες του V εκτός από την i στήλη. Επομένως, πρέπει $q_i = \pm v_i$. Περαιτέρω
$$h_{i,i-1} = e^T He_{i-1} = e^T Q^T AQe_{i-1} = e^T Q^T VGV^T Qe_{i-1} = w^T Gw_{i-1} = \pm g_{i,i-1},$$

έτσι, $|h_{i,i-1}| = |g_{i,i-1}|$. Αν $h_{k+1,k} = 0$ τότε

$$g_{k+1,k} = e_{k+1}^T G e_k = \pm e_{k+1}^T G W e_k = \pm e_{k+1}^T W H e_k = \pm e_{k+1}^T \sum_{j=1}^{k} w_j h_{j,k} = 0.$$

αφού $e_{k+1}^T w_j = \pm e_{k+1}^T e_j = 0$ για $j \leq k$. $\square$

Θα εφαρμόσουμε το έμμεσο (implicit) θεώρημα Q ως εξής: Θα υπολογίσουμε τον πίνακα Hessenberg $H_{k+1} = Z^T H_{k-1} Z$ όπου ZR είναι η παραγοντοποίηση QR του $M = H_{k-1}^2 - sH_{k-1} + tI$. Το Θεώρημα 5.7.1 μας λέει ότι παίρνουμε τον H_{k+1} με οποιονδήποτε ορθογώνιο μετασχηματισμό ομοιότητας $H_{k-1} \to Z_1^* H_{k-1} Z_1$ με την προϋπόθεση ότι ο $Z_1^* H Z_1$ είναι Hessenberg και $Z_1 e_1 = Z e_1$.

Έστω P_0 ένας Householder ανακλαστής με

$$P_0^T M e_1 = P_0^T (H_{k-1}^2 - 2\mathrm{Re}(\sigma) H_{k-1} + |\sigma|^2 I) e_1 = a e_1.$$

Δεδομένου ότι μόνο τα τρία πρώτα στοιχεία της πρώτης στήλης Me_1 του M είναι μη μηδενικά, το P_0 έχει τη δομή

$$P_0 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & & & \\ \times & \times & \times & & & \\ \times & \times & \times & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Άρα,

$$H_{k-1}' := P_0^T H_{k-1} P_0 = \left[\begin{array}{ccc|cccc} \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ + & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \hline + & + & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times & \times \\ & & & & & \times & \times \end{array}\right].$$

Θα μειώσουμε τώρα τον $P_0^T H_{k-1} P_0$ σε μορφή Hessenberg με τον ίδιο τρόπο όπως πριν, με μια ακολουθία Householder ανακλαστών $P_1, \ldots, P_{n-2}$. Ωστόσο, ο $P_0^T H_{k-1} P_0$ είναι ένας Hessenberg πίνακας μέχρι και τα τρία στοιχεία πάνω αριστερά που προεξέχουν. Λαμβάνουμε υπόψιν μας αυτή τη δομή όταν σχηματίζουμε τον $P_i = I - 2p_i p_i^T$. Άρα, η δομή του P_1 και του $P_1^T P_0^T H_{k-1} P_0 P_1$ είναι

$$P_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \times & \times & \times & & & \\ & \times & \times & \times & & & \\ & \times & \times & \times & & & \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & 1 & \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}, H_{k-1}'' = P_1^T H_{k-1}' P_1 = \left[\begin{array}{c|ccc|ccc} \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \hline \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & + & \times & \times & \times & \times & 7\times \\ \hline & + & + & \times & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times & \times \\ & & & & & \times & \times \end{array}\right]$$

Ο μετασχηματισμός με το P_1 έχει μετατοπίσει τα στοιχεία που προεξέχουν μία θέση προς τα κάτω στη διαγώνιο. Οι διαδοχικοί ανακλαστές το σπρώχνουν περαιτέρω κατά μία θέση ο καθένας μέχρι να βγει έξω από τον πίνακα στο τέλος της διαγωνίου. Έχουμε, δηλαδή

$$H_{k-1}^{'''} = P_2^T H_{k-1}^{''} P_2 = \left[\begin{array}{cc|ccc|cc} \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \hline & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & 0 & \times & \times & \times & \times & \times \\ & 0 & + & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & + & + & \times & \times & \times \\ & & & & & \times & \times \end{array}\right]$$

$$H_{k-1}^{'''} = P_3^T H_{k-1}^{'''} P_3 = \left[\begin{array}{ccc|ccc|c} \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & 0 & \times & \times & \times & \times \\ & & 0 & + & \times & \times & \times \\ \hline & & & + & + & \times & \times \end{array}\right]$$

$$H_{k-1}^{'''} = P_4^T H_{k-1}^{'''} P_4 = \left[\begin{array}{cccc|ccc} \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & & \times & \times & \times & \times \\ & & & 0 & \times & \times & \times \\ & & & 0 & + & \times & \times \end{array}\right]$$

$$H_{k-1}^{'''} = P_5^T H_{k-1}^{'''} P_5 = \left[\begin{array}{ccccc|cc} \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & & & \times & \times & \times \\ & & & & 0 & \times & \times \end{array}\right]$$

Βλέπουμε ότι το διάνυσμα Householder p_i, $i < n-2$, έχει μόνο τρία μη μηδενικά στοιχεία στη θέση $i+1, i+2, i+3$. Από το p_{n-2} μόνο τα δύο τελευταία στοιχεία είναι μη μηδενικά. Προφανώς, $P_0 P_1 \cdots P_{n-2} e_1 = P_0 e_1 = M e_1 / a$.

Σχόλιο. Παρατηρούμε ότι στον Αλγόριθμο 5 γίνεται διπλό βήμα επίσης αν οι ιδιοτιμές του

$$G = \begin{bmatrix} h_{qq} & h_{qp} \\ h_{pq} & h_{pp} \end{bmatrix}$$

είναι πραγματικές. Όπως και στη μιγαδική περίπτωση θέτουμε $s = \mathrm{trace}(G)$ και $t = \det(G)$.

Algorithm 5 Ο αλγόριθμος QR διπλού βήματος Francis

Έστω $H_0 = H \in M_n(\mathbb{R})$ ένας άνω Hessenberg πίνακας. Αυτός ο αλγόριθμος υπολογίζει την πραγματική μορφή του Schur $H = UTU^T$ χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο QR διπλού βήματος του Francis. Ο T είναι ένας σχεδόν άνω τριγωνικός πίνακας.

$p := n$; /* p δείχνει το 'ενεργό' μέγεθος του πίνακα. */

while $p > 2$ **do**

  $q := p - 1$;

  $s := H_{q,q} + H_{p,p}$; $t := H_{q,q}H_{p,p} - H_{q,p}H_{p,q}$;

  /* Υπολογίζουμε τα 3 πρώτα στοιχεία της πρώτης στήλης του M */

  $x := H_{1,1}^2 + H_{1,2}H_{2,1} - sH_{1,1} + t$;

  $y := H_{2,1}(H_{1,1} + H_{2,2} - s)$;

  $z := H_{2,1}H_{3,2}$;

  for $k = 0$ έως $p - 3$ **do**

    Προσδιορίζουμε τον ανακλαστή Householder P με $P^T[x; y; z]^T = ae_1$;

    $r := \max\{1, k\}$;

    $H_{k+1:k+3,r:n} := P^T H_{k+1:k+3,r:n;}$

    $r := \min\{k + 4, p\}$;

    $H_{1:r,k+1:k+3} := H_{1:r,k+1:k+3}P$;

    $x := H_{k+2,k+1}$; $y := H_{k+3,k+1}$;

    if $k < p - 3$ **then**

      $z := H_{k+4,k+1}$;

    end if

  end for

  Προσδιορίζουμε τον ανακλαστή Householder P με $P^T[x; y]^T = ae_1$;

  $H_{q:p,p-2:n} := P^T H_{q:p,p-2:n}$;

  $H_{1:p,p-1:p} := H_{1:p,p-1:p}P$;

  /* Ελέγχουμε για την σύγκλιση */

  if $|H_{p,q}| < \varepsilon(|H_{q,q}| + |H_{p,p}|)$ **then**

    $H_{p,q} := 0$; $p := p - 1$; $q := p - 1$;

  else if $|H_{p-1,q-1}| < \varepsilon(|H_{q-1,q-1}| + |H_{q,q}|)$ **then**

    $H_{p-1,q-1} := 0$; $p := p - 2$; $q := p - 1$;

  end if

end while

Παράδειγμα 5.7.1. Εφαρμόζουμε τον Αλγόριθμο 5 στον πίνακα

$$H = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 3 \\ 0 & 0.01 & 1 \end{bmatrix}$$

του Παραδείγματος 5.3.1, τότε

$$P_0 = \begin{bmatrix} -0.6 & -0.8 & 0 \\ -0.8 & 0.6 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad P_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.9997 & -0.025 \\ 0 & -0.025 & 0.9997 \end{bmatrix}$$

και

$$\bar{H} = \begin{bmatrix} 4.76 & -2.5891 & -3.6659 \\ 0.3201 & 0.2456 & -0.2188 \\ 0 & -0.0248 & 0.9944 \end{bmatrix}.$$

5.8 Πολυπλοκότητα

Αρχικά υπολογίζουμε την πολυπλοκότητα ενός μόνο βήματος του διπλού βήματος Hessenberg QR αλγορίθμου. Οι πιο ακριβές λειτουργίες είναι οι εφαρμογές των 3×3 ανακλαστών Householder στα βήματα 13 και 15 του Αλγορίθμου 5. Θα μετρήσουμε πρώτα τις πράξεις για την εφαρμογή του ανακλαστή Householder σε ένα διάνυσμα

$$x := (I - 2uu^T)x = x - u(2u^T x).$$

Το εσωτερικό γινόμενο $u^T x$ κοστίζει 5 πράξεις, πολλαπλασιαζόμενο με 2 ακόμα ένα. Ο τελεστής $x := x - u\gamma, \gamma = 2u^T x$, κοστίζει 6 πράξεις, συνολικά 12 πράξεις.

Στο k-ο βήμα του βρόχου υπάρχουν $n - k$ από αυτές τις εφαρμογές από αριστερά στο βήμα 13 και $k + 4$ από δεξιά στο βήμα 15. Επομένως σε αυτό το βήμα υπάρχουν περίπου $12n + O(1)$ πράξεις που πρέπει να εκτελεστούν. Καθώς το k τρέχει από το 1 έως το $p - 3$. Έχουμε περίπου $12pn$ πράξεις για αυτό το βήμα. Εφόσον το p τρέχει από το n έως το 2 περίπου, έχουμε $6n^3$ πράξεις. Αν υποθέσουμε ότι απαιτούνται δύο βήματα ανά ιδιοτιμή, ο αριθμός πράξεων για τον αλγόριθμο QR διπλού βήματος του Francis για τον υπολογισμό όλων των ιδιοτιμών ενός πραγματικού πίνακα Hessenberg είναι $12n^3$. Αν επίσης συγκεντρωθεί ο πίνακας ιδιοδιανυσμάτων, οι δύο πρόσθετες προτάσεις πρέπει να εισαχθούν στον Αλγόριθμο 5. Μετά το βήμα 15 έχουμε

```
1: Q_{1:n,k+1:k+3} := Q_{1:n,k+1:k+3} P ;
```

και μετά το βήμα 23 εισάγουμε

```
1: Q_{1:n,p-1:p} := Q_{1:n,p-1:kp} P ;
```

το οποίο κοστίζει άλλες $12n^3$ πράξεις.

Νωρίτερα δώσαμε την εκτίμηση των $6n^3$ πράξεων για ένα βήμα QR Hessenberg, (Αλγόριθμος 2). Αν ο αλγόριθμος αυτός χρησιμοποιηθεί σε μιγαδική αριθμητική, τότε ο αλγόριθμος QR Hessenberg μιας μετατόπισης είναι πιο ακριβός από τον αλγόριθμο QR διπλής μετατόπισης Hessenberg που εκτελείται σε πραγματική αριθμητική. Όπως είδαμε η αναγωγή σε μορφή Hessenberg κοστίζει $\frac{10}{3}n^3$ πράξεις χωρίς να σχηματιστεί ο πίνακας μετασχηματισμού και $\frac{14}{3}n^3$ αν σχηματιστεί αυτός ο πίνακας.

5.9 Ο συμμετρικός τριδιαγώνιος αλγόριθμος QR

Ο αλγόριθμος QR μπορεί να εφαρμοστεί απευθείας σε ερμιτιανούς ή συμμετρικούς πίνακες. Από την (5.1) βλέπουμε ότι ο αλγόριθμος QR δημιουργεί μια ακολουθία A_k συμμετρικών πινάκων. Λαμβάνοντας υπόψη τη συμμετρία, η απόδοση του αλγορίθμου μπορεί να βελτιωθεί σημαντικά. Επιπλέον, γνωρίζουμε ότι οι ερμιτιανοί πίνακες έχουν πραγματικό φάσμα. Επομένως, μπορούμε να περιοριστούμε σε μεμονωμένες μετατοπίσεις.

5.9.1 Αναγωγή σε τριδιαγώνια μορφή

Η αναγωγή ενός πλήρους ερμιτιανού πίνακα σε μορφή Hessenberg παράγει έναν πίνακα Hermitian Hessenberg, ο οποίος (μέχρι τα σφάλματα στρογγυλοποίησης) είναι ένας πραγματικός συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας. Θα εξετάσουμε πώς θα λάβουμε υπόψιν μας τη συμμετρία. Για το σκοπό αυτό, θα εξετάσουμε το πρώτο βήμα αναγωγής που εισάγει $n-2$ μηδενικά στην πρώτη στήλη (και στην πρώτη σειρά) του $A = A^* \in M_n(\mathbb{C})$. Έστω

$$P_1 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & I_{n-1} - 2w_1w_1^* \end{bmatrix}, \qquad w_1 \in \mathbb{C}^n, \quad \|w_1\| = 1.$$

Τότε,

$$\begin{aligned} A_1 := P_1^* A P_1 &= (I - 2w_1w_1^*)A(I - 2w_1w_1^*) \\ &= A - w_1 \underbrace{(2w_1^*A - 2(w_1^*Aw_1)w_1^*)}_{v_1^*} - \underbrace{(2Aw_1 - 2w_1(w_1^*Aw_1))}_{v_1} w_1^* \\ &= A - w_1v_1^* - v_1w_1^*. \end{aligned}$$

Στο k-ο βήμα της αναγωγής ομοίως έχουμε

$$A_k = P_k^* A_{k-1} P_k = A_{k-1} - w_{k-1}v_{k-1}^* - v_{k-1}w_{k-1}^*$$

όπου τα τελευταία $n-k$ στοιχεία των w_{k-1} και v_{k-1} είναι μη μηδενικά. Για την δημιουργία του

$$v_{k-1} = 2A_{k-1}w_{k-1} - 2w_{k-1}(w_{k-1}^*A_{k-1}w_{k-1})$$

το κόστος είναι $2(n-k)^2 + O(n-k)$ πράξεις. Αυτή η πολυπλοκότητα προκύπτει από το $A_{k-1}w_{k-1}$. Η ενημέρωση τάξης-2 του A_{k-1},

$$A_k = A_{k-1} - w_{k-1}v_{k-1}^* - v_{k-1}w_{k-1}^*,$$

απαιτεί άλλες $2(n-k)^2+O(n-k)$ πράξεις, λαμβάνοντας υπόψη τη συμμετρία. Συνεπώς, ο μετασχηματισμός σε τριδιαγώνια μορφή μπορεί να επιτευχθεί σε

$$\sum_{k=1}^{n-1} (4(n-k)^2 + O(n-k)) = \frac{4}{3}n^3 + O(n^2)$$

πράξεις κινητής υποδιαστολής.

5.9.2 Ο τριδιαγώνιος αλγόριθμος QR

Στη συμμετρική περίπτωση ο αλγόριθμος Hessenberg QR γίνεται ένας τριδιαγώνιος QR αλγόριθμος. Αυτό μπορεί να εκτελεστεί με άμμεσο (explicit) ή έμμεσο (implicit) τρόπο. Στην άμμεση (explicit) μορφή, ένα βήμα QR είναι ουσιαστικά

1: Επιλογή μιας μετατόπισης μ
2: Υπολογισμός της QR παραγοντοποίησης $A - \mu I = QR$
3: Ενημέρωση του A από $A = RQ + \mu I$.

Φυσικά, αυτό γίνεται με επίπεδες περιστροφές και με σεβασμό της συμμετρικής τριδιαγώνιας δομής του A.

Στην πιο κομψή έμμεση (implicit) μορφή του αλγορίθμου υπολογίζουμε πρώτα την πρώτη περιστροφή Givens $G_0 = G(1,2,\theta)$ της παραγοντοποίησης QR που μηδενίζει το στοιχείο $(2,1)$ του $A - \mu I$,

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} - \mu \\ a_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad c = \cos(\theta_0), \quad s = \sin(\theta_0). \tag{5.10}$$

Εκτελώντας έναν παρόμοιο μετασχηματισμό με τον G_0 έχουμε $(n = 5)$

$$G_0^* A G_0 = A' = \begin{bmatrix} \times & \times & + & & \\ \times & \times & \times & & \\ + & \times & \times & \times & \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}.$$

Σε ένα παράδειγμα 5×5 αυτό γίνεται

$$A \xrightarrow[=G(1,2,\theta_0)]{G_0} \begin{bmatrix} \times & \times & + & & \\ \times & \times & \times & & \\ + & \times & \times & \times & \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow[=G(2,3,\theta_1)]{G_1} \begin{bmatrix} \times & \times & 0 & & \\ \times & \times & \times & + & \\ 0 & \times & \times & \times & \\ & + & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[=G(3,4,\theta_2)]{G_2} \begin{bmatrix} \times & \times & 0 & & \\ \times & \times & \times & + & \\ & \times & \times & \times & + \\ & 0 & \times & \times & \times \\ & & + & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow[=G(4,5,\theta_3)]{G_3} \begin{bmatrix} \times & \times & & & \\ \times & \times & \times & + & \\ & \times & \times & \times & 0 \\ & & \times & \times & \times \\ & & 0 & \times & \times \end{bmatrix} = \bar{A}.$$

Το πλήρες βήμα δίνεται από

$$\bar{A} = Q^* A Q, \qquad Q = G_0 G_1 - \cdots G_{n-2}.$$

Επειδή $G_k e_1 = e_1$ για $k > 0$ έχουμε

$$Q e_1 = G_0 G_1 \cdots G_{n-2} e_1 = G_0 e_1.$$

Τόσο το άμμεσο (explicit) όσο και το έμμεσο (implicit) βήμα QR σχηματίζουν την ίδια πρώτη περιστροφή επιπέδου G_0. Από το Θεώρημα 5.3 βλέπουμε ότι το άμμεσο (explicit) και το έμμεσο (implicit) QR βήμα υπολογίζουν ουσιαστικά τον ίδιο $\bar{A}$.

Algorithm 6 Συμμετρικός τριδιαγώνιος αλγόριθμος QR με implicit Wilkinson μετατόπιση

Έστω $T \in M_n(\mathbb{R})$ ένας συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας με διαγώνια στοιχεία $a_1, \ldots, a_n$ και στοιχεία εκτός διαγωνίου $b_2, \ldots, b_n$.
Αυτός ο αλγόριθμος υπολογίζει τις ιδιοτιμές $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ του T και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα $q_1, \ldots, q_n$. Οι ιδιοτιμές αποθηκεύονται στα $a_1, \ldots, a_n$. Τα ιδιοδιανύσματα αποθηκεύονται στον πίνακα Q, έτσι ώστε $TQ = Q\,\mathrm{diag}(a_1, \ldots, a_n)$.
$m = n$ /* Πραγματική διάσταση προβλήματος. m μειώνεται στον έλεγχο σύγκλισης. */
$Q = I_n$;
while $m > 1$ **do**
  $d := (a_{m-1} - a_m)/2$; /* Υπολογίζουμε μετατόπιση Wilkinson */
  if $d = 0$ **then**
    $s := a_m - |b_m|$;
  else
    $s := a_m - b_m^2/(d + sign(d)\sqrt{d^2 + b_m^2})$;
  end if
  $x := a(1) - s$; /* Implicit QR βήμα ξεκινάει εδώ */
  $y := b(2)$;
  for $k = 1$ έως $m - 1$ **do**
    if $m > 2$ **then**
      $[c, s] :=$ **givens**(x, y)
    else
      Προσδιορίζουμε το $[c, s]$ έτσι ώστε ο $\begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 & b_2 \\ b_2 & a_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}$ είναι διαγώνιος
    end if
    $w := cx - sy$;
    $d := a_k - a_{k+1}$; $z := (2cb_{k+1} + d_s)s$;
    $a_k := a_k - z$; $a_{k+1} := a_{k+1} + z$;
    $b_{k+1} := dcs + (c^2 - s^2)b_{k+1}$;
    $x := b_{k+1}$;
    if $k > 1$ **then**
      $b_k := w$;
    end if
    if $k < m - 1$ **then**
      $y := -sb_{k+2}$; $b_{k+2} := cb_{k+2}$;
    end if$Q_{1:n;k:k+1} := Q_{1:n;k:k+1} \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}$;
  end for/* Implicit QR βήματα τελειώνουν εδώ */
  if $|b_m| < \varepsilon(|a_{m-1}| + |a_m|)$ **then** /* Ελέγχουμε για σύγκλιση */
    $m := m - 1$;
  end if
end while

Ο Αλγόριθμος 6 δείχνει τον έμμεσο (implicit) συμμετρικό τριδιαγώνιο αλγόριθμο QR. Οι μετατοπίσεις επιλέγονται σύμφωνα με τον Wilkinson. Ένα ζήτημα που δεν αντιμετωπίζεται σε αυτόν τον αλγόριθμο είναι η υποτίμηση (deflation). Η υποτίμηση (deflation) έχει μεγάλη πρακτική σημασία. Θα εξετάσουμε την ακόλουθη περίπτωση ενός πίνακα 6×6

$$T = \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & & & & \\ b_2 & a_2 & b_3 & & & \\ & b_3 & a_3 & 0 & & \\ & & 0 & a_4 & b_5 & \\ & & & b_5 & a_5 & b_6 \\ & & & & b_6 & a_6 \end{bmatrix}.$$

Η μετατόπιση για το επόμενο βήμα καθορίζεται από τα στοιχεία a_5, a_6 και b_6. Σύμφωνα με το (5.10) η πρώτη περιστροφή επιπέδου προσδιορίζεται από τη μετατόπιση και τα στοιχεία a_1 και b_1. Στη συνέχεια, ο έμμεσος (implicit) αλγόριθμος μετατόπισης μετατοπίζει τα στοιχεία που προεξέχουν κάτω στη διαγώνιο. Σε αυτή τη συγκεκριμένη περίπτωση, η διαδικασία τελειώνει ήδη στη γραμμή/στήλη 4 επειδή $b_4 = 0$. Έτσι, η μετατόπιση που είναι μια προσέγγιση σε μια ιδιοτιμή του δεύτερου μπλοκ (σειρές 4 έως 6) εφαρμόζεται στο λάθος πρώτο μπλοκ (σειρές 1 έως 3). Σαφώς, αυτή η μετατόπιση δεν βελτιώνει τη σύγκλιση.

Αν ο αλγόριθμος QR εφαρμοστεί στην άμμεση (explicit) μορφή του, τότε και πάλι το πρώτο μπλοκ δεν επεξεργάζεται σωστά, δηλαδή με μια (πιθανώς) λανθασμένη μετατόπιση, αλλά τουλάχιστον το δεύτερο μπλοκ διαγωνιοποιείται γρήγορα.

Η υποτίμηση (deflation) γίνεται όπως υποδεικνύεται στον Αλγόριθμο 6:

$$\textbf{if} \quad |b_k| < \varepsilon(|a_{k-1}| + |a_k|) \quad \textbf{then} \quad \text{deflate}.$$

Η υποτίμηση (deflation) είναι ιδιαίτερα απλή στη συμμετρική περίπτωση, καθώς σημαίνει ότι ένα πρόβλημα τριδιαγώνιας ιδιοτιμής χωρίζεται σε δύο (ή περισσότερα) μικρότερα προβλήματα τριδιαγώνιας ιδιοτιμής. Παρατηρούμε, ωστόσο, ότι τα ιδιοδιανύσματα εξακολουθούν να έχουν μήκος n στοιχείων.

Παράδειγμα 5.9.1. Αν εφαρμόσουμε τον Αλγόριθμο 6 στον

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & .01 \\ 0 & 0 & .01 & 4 \end{bmatrix},$$

τότε ο νέος τριδιαγώνιος πίνακας T δίνεται από

$$T = \begin{bmatrix} .5000 & .5916 & 0 & 0 \\ .5916 & 1.785 & .1808 & 0 \\ 0 & .1808 & 3.7140 & .0000044 \\ 0 & 0 & .0000044 & 4.002497 \end{bmatrix}.$$

Βιβλιογραφία

[1] Anton, H. & Rorres, C. (2013), *Elementary Linear Algebra*, Applications Version-Wiley (11th ed.).

[2] Golub, G. H. & Van Loan C. F., (1996), *Matrix Computations*, Baltimore: Johns Hopkins University Press (3rd ed.).

[3] Horn, R. A. & Johnson, C. R. (2014), *Matrix Analysis*, Cambridge University Press (2nd ed.).

[4] Jarlebring, E., *Notes for QR-methods (preliminary version)*, ανακτήθηκε από https://www.math.kth.se/na/SF2524/matber15/qrmethod.pdf.

[5] Nicholson, W. K. (2013), *Linear Algebra with Applications*, McGraw-Hill Ryerson, (7th ed.).

[6] Trefethen, L. N. & Bau, D. III (1997), *Numerical linear algebra*, Society for Industrial and Applied Mathematics.

[7] Μητρούλη, Μ., *Αριθμητική Γραμμική Αλγεβρα*, ανακτήθηκε από https://eclass.uoa.gr/modules/document/file.php/MATH160/simeioseis_book.pdf.