Metody numeryczne w fizyce
FZP002934wcL
rok akademicki 2020/21
semestr letni

Wykład 12

Karol Tarnowski
karol.tarnowski@pwr.edu.pl
L-1 p. 220

Politechnika Wrocławska

Plan wykładu

- Algebraiczne zagadnienie własne
- Metoda potęgowa
- Faktoryzacja Schura
- Lokalizacja wartości własnych – twierdzenie Gerszgorina

Politechnika Wrocławska

- D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza numeryczna*, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, 2006, rozdział 5

Drgania pręta

$$u'' = -k^2 u$$

$$x_i = a + ih = a + i\frac{b-a}{n+1}, \quad i = 0,1,\ldots,n+1$$

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = -k^2 u_i$$

$$u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} = -k^2 h^2 u_i$$

Drgania pręta

$$u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} = \lambda u_i$$

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} u = \lambda u$$

Algebraiczne zagadnienie własne

- Niech A będzie macierzą kwadratową stopnia n, o elementach zespolonych, a λ liczbą zespoloną.
- Jeśli równanie

$$Ax = \lambda x$$

jest spełnione przez pewien wektor x o n składowych zespolonych nie wszystkich równych 0, to λ jest wartością własną, a x wektorem własnym macierzy A.

Algebraiczne zagadnienie własne

- macierz $A - \lambda I$ przekształca pewien wektor niezerowy na 0
- macierz $A - \lambda I$ jest osobliwa
- $\det(A - \lambda I) = 0$

$$\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33}-\lambda & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

Algebraiczne zagadnienie własne

- równanie charakterystyczne

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

- wielomian charakterystyczny

Podobieństwo macierzy

- Macierze A i B są podobne jeśli istnieje taka macierz nieosobliwa P, że $B = PAP^{-1}$ (oraz $QBQ^{-1} = A$, gdzie $Q = P^{-1}$)
- Macierze podobne mają te same zbiory wartości własnych

Metoda potęgowa

- Tylko jedna wartość własna ma największy moduł
- Istnieje układ *n* wektorów własnych liniowo niezależnych

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$$

$$u^{(j)} : Au^{(j)} = \lambda_j u^{(j)}$$

Metoda potęgowa

- Niech $x^{(0)}$ będzie dowolną kombinacją liniową tych wektorów własnych z niezerowym współczynnikiem przy $u^{(1)}$

$$x^{(0)} = u^{(1)} + \sum_{j=2}^{n} a_j u^{(j)}$$

$$x^{(1)} = Ax^{(0)} = Au^{(1)} + \sum_{j=2}^{n} a_j A u^{(j)}$$

$$x^{(2)} = Ax^{(1)} = A^2 u^{(1)} + \sum_{j=2}^{n} a_j A^2 u^{(j)}$$

Metoda potęgowa

$$x^{(k)} = A^k x^{(0)} = A^k u^{(1)} + \sum_{j=2}^{n} a_j A^k u^{(j)}$$

$$x^{(k)} = \lambda_1^k u^{(1)} + \sum_{j=2}^{n} a_j \lambda_j^k u^{(j)}$$

$$x^{(k)} = \lambda_1^k \left(u^{(1)} + \sum_{j=2}^{n} a_j \frac{\lambda_j^k}{\lambda_1^k} u^{(j)} \right)$$

$$x^{(k)} = \lambda_1^k \left(u^{(1)} + \varepsilon^{(k)} \right)$$

Metoda potęgowa

- Niech φ będzie dowolnym funkcjonałem liniowym określonym na C^n i takim, że $\varphi(u^{(1)}) \neq 0$

$$x^{(k)} = \lambda_1^k \left(u^{(1)} + \varepsilon^{(k)} \right)$$

$$\varphi\left(x^{(k)} \right) = \lambda_1^k \left(\varphi\left(u^{(1)} \right) + \varphi\left(\varepsilon^{(k)} \right) \right)$$

$$r_k = \frac{\varphi\left(x^{(k+1)} \right)}{\varphi\left(x^{(k)} \right)} = \frac{\lambda_1^{k+1} \left(\varphi\left(u^{(1)} \right) + \varphi\left(\varepsilon^{(k)} \right) \right)}{\lambda_1^k \left(\varphi\left(u^{(1)} \right) + \varphi\left(\varepsilon^{(k)} \right) \right)} \rightarrow \lambda_1$$

Odwrotna metoda potęgowa

- Jeśli λ jest wartością własną macierzy nieosobliwej A, to λ^{-1} jest wartością własną macierzy A^{-1}

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n| > 0$$

$$|\lambda_n^{-1}| > |\lambda_{n-1}^{-1}| \geq |\lambda_{n-2}^{-1}| \geq \cdots \geq |\lambda_2^{-1}| \geq |\lambda_1^{-1}| > 0$$

$$x^{(k+1)} = A^{-1} x^{(k)}$$

$$A x^{(k+1)} = x^{(k)}$$

Metoda potęgowa z macierzą przesuniętą

$$A - \mu I$$

$$0 < \left|\lambda_k - \mu\right| < \varepsilon \text{ oraz } \left|\lambda_j - \mu\right| > \varepsilon \text{ dla } j \neq k$$

- stosując odwrotną metodę potęgową można znaleźć $(\lambda_k - \mu)^{-1}$

Faktoryzacja Schura

- macierze A i B są podobne jeśli istnieje taka macierz nieosobliwa P, że $B = PAP^{-1}$ (oraz $QBQ^{-1} = A$, gdzie $Q = P^{-1}$)
- niech B będzie trójkątna

Faktoryzacja Schura
Pojęcia

- A^H – macierz sprzężona z A

$$\left(A^H\right)_{ij} = \overline{\left(A\right)_{ji}}$$

- U – nazywamy unitarną jeśli $UU^{\mathrm{H}} = I$
- A i B są unitarnie podobne jeśli $B = UAU^H$

Faktoryzacja Schura
Lemat I

- macierz $I - vv^H$ jest unitarna wtedy i tylko wtedy, gdy $\|v\|_2^2 = 2$ lub $v = 0$

- niech $U = \left(I - vv^H\right)$

$$UU^H = \left(I - vv^H\right)\left(I - vv^H\right)^H = \left(I - vv^H\right)\left(I - vv^H\right) =$$

$$= I - 2vv^H + vv^H vv^H = I - 2vv^H + v\left(v^H v\right)v^H =$$

$$= I - 2vv^H + \left(v^H v\right)vv^H = I - \left[2 - v^H v\right]vv^H = I - \left[2 - \|v\|_2^2\right]vv^H$$

Faktoryzacja Schura

Lemat II

- jeśli wektory x i y są takie, że $\|x\|_2 = \|y\|_2$ i $x^H y$ jest rzeczywiste, to istnieje macierz unitarna $U = I - vv^H$, dla której $Ux = y$
- jeśli $x = y$, to $U = I$ oraz $v = 0$
- jeśli $x \neq y$, to przyjmujemy $v = \alpha(x - y)$, gdzie

$\alpha = \dfrac{\sqrt{2}}{\|x - y\|_2}$, wtedy $\|v\|_2^2 = 2$

sprawdzamy, czy $Ux = y$

Faktoryzacja Schura
Lemat II (2)

$$Ux-y=\left(I-vv^H\right)x-y=x-vv^Hx-y=x-y-vv^Hx=$$

$$=(x-y)-\alpha^2(x-y)\left(x^H-y^H\right)x=(x-y)\left[1-\alpha^2\left(x^Hx-y^Hx\right)\right]$$

$$1-\alpha^2\left(x^Hx-y^Hx\right)=1-\frac{1}{2}\alpha^2\left(2x^Hx-2y^Hx\right)=$$

$$=1-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x^Hx+x^Hx-y^Hx-y^Hx\right)=1-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x^Hx+\underbrace{y^Hy}_{\|x\|_2=\|y\|_2}-y^Hx-\underbrace{x^Hy}_{y^Hx\in R}\right)=$$

$$=1-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x^H(x-y)+y^H(y-x)\right)=1-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x^H-y^H\right)(x-y)=$$

$$=1-\frac{1}{2}\alpha^2\|x-y\|_2^2=0$$

Faktoryzacja Schura
Twierdzenie

- Każda macierz kwadratowa jest unitarnie podobna do macierzy trójkątnej górnej
- Dowód indukcyjny względem stopnia macierzy n
  - dla n = 1 twierdzenie jest prawdziwe
  - załóżmy, że jest prawdziwe dla macierzy stopnia $n-1$ i rozważmy macierz A stopnia n, niech λ będzie jej wartością własną, a $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ odpowiednim wektorem własnym

Faktoryzacja Schura
Dowód

- załóżmy, że jest prawdziwe dla macierzy stopnia $n - 1$ i rozważmy macierz A stopnia n
- niech λ będzie jej wartością własną, a $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ odpowiednim wektorem własnym (można założyć, że $\|x\|_2 = 1$)
- zdefiniujmy $\beta = \operatorname{sgn} x_1$ dla $x_1 \neq 0$ oraz $\beta = 1$ w p. p.
- wprowadźmy też wektor jednostkowy $e^{(1)} = (1, 0, \ldots, 0)$
- istnieje macierz unitarna U taka, że $Ux = \beta e^{(1)}$

Faktoryzacja Schura
Dowód (2)

- istnieje macierz unitarna U taka, że $Ux = \beta\, e^{(1)}$
- stąd $\beta^{-1}x = U^H e^{(1)}$
- oraz $UAU^H e^{(1)} = UA\,\beta^{-1}x = \beta^{-1}UAx = \beta^{-1}\lambda Ux =$
  $= \beta^{-1}\lambda\beta\, e^{(1)} = \lambda\, e^{(1)}$
- zatem pierwszą kolumną UAU^H jest $\lambda\, e^{(1)}$

Faktoryzacja Schura
Dowód (3)

- pierwszą kolumną UAU^{H} jest $\lambda\, e^{(1)}$
- niech $\tilde{A}$ będzie macierzą powstałą z UAU^{H} przez skreślenie pierwszego wiersza i kolumny
- istnieje macierz unitarna Q taka, że $Q\tilde{A}Q^{H}$ jest trójkątna górna
- wprowadźmy macierz $V = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q \end{bmatrix} U$
- V jest unitarna jako iloczyn macierzy unitarnych

Faktoryzacja Schura
Dowód (4)

- $V = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q \end{bmatrix} U$ sprowadza A do trójkątnej górnej

$$VAV^H = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q \end{bmatrix} UAU^H \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q^H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda & w \\ 0 & \tilde{A} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q^H \end{bmatrix}$$

$$VAV^H = \begin{bmatrix} \lambda & w \\ 0 & Q\tilde{A} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q^H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda & wQ^H \\ 0 & Q\tilde{A}Q^H \end{bmatrix}$$

Faktoryzacja Schura
Wniosek

- każda macierz hermitowska jest unitarnie podobna do macierzy przekątniowej
- niech U : UAU^{H} jest trójkątna górna
- wtedy $(UAU^{H})^{H}$ jest trójkątna dolna
- ale $(UAU^{H})^{H} = (U^{H})^{H}A^{H}U^{H} = UAU^{H}$
- czyli UAU^{H} jest trójkątna górna i jednocześnie jest trójkątna dolna – jest przekątniowa

Faktoryzacja Schura
Zastosowanie

- jeśli znamy wartość własną λ macierzy A stopnia n to możemy utworzyć macierz $\tilde{A}$ stopnia $n - 1$, której wartościami własnymi są pozostałe wartości własne A
  1. znaleźć x odpowiadający λ
  2. zdefiniować β j.w.
  3. znaleźć $\alpha = \dfrac{\sqrt{2}}{\left\| x - \beta e^{(1)} \right\|_2}$, $v = \alpha\left(x - \beta e^{(1)}\right)$, $U = I - vv^H$
  4. obliczyć UAU^{H} skreślić pierwszy wiersz i kolumnę

Twierdzenie Gerszgorina

- Widmo dowolnej macierzy A stopnia n zawiera się w sumie następujących kół na płaszczyźnie zespolonej:

$$D_i = \left\{ z \in C : \left| z - a_{ii} \right| \leq \sum_{j=1, j \neq i}^{n} \left| a_{ij} \right| \right\} \text{ dla } 1 \leq i \leq n$$

Twierdzenie Gerszgorina

Dowód

- niech λ będzie wartością własną macierzy A i x będzie odpowiadającym jej wektorem własnym takim, że $\|x\|_\infty = 1$
- dla pewnego i $|x_i| = 1$
- ponieważ $Ax = \lambda x$, zatem $(Ax)_i = \lambda x_i$ oraz

$$\lambda x_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \qquad (\lambda - a_{ii}) x_i = \sum_{j=1, j \neq i}^{n} a_{ij} x_j$$

Twierdzenie Gerszgorina

Dowód (2)

$$(\lambda - a_{ii})x_i = \sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij}x_j$$

- z nierówności trójkąta oraz $|x_j| \leq 1 = |x_i|$

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}||x_j| \leq \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$$

Twierdzenie Gerszgorina

Przykład

$$A = \begin{bmatrix} -1+i & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & 1 & \frac{1}{4} \\ 1 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$