# METODE NUMERICE: Laborator #8
# Metoda QR cu deplasare explicită pentru matrice simetrice.

Titulari curs: *Florin Pop, George-Pantelimon Popescu*

Responsabil Laborator: **Adelina Vidovici**

## Obiective Laborator

În urma parcurgerii acestui laborator, studentul va fi capabil să:

- Construiască o matrice de rotație
- Utilizeze metoda QR cu deplasare explicită pentru a determina valorile proprii ale unei matrici simetrice tridiagonale;

## Noțiuni teoretice

Din cauza creșterii rapide a erorii obținute, metodele studiate în cadrul laboratorului anterior nu se pretează la calcularea tuturor valorilor proprii.

O alternativă este algoritmul QR care determină simultan toate valorile proprii ale unei matrici simetrice tridiagonale. Vom putea determina valorile proprii pentru orice matrice simetrică folosind în prealabil metoda Householder, metodă care transformă o matrice simetrică într-una tridiagonală (tot simetrică).

Matricea A de dimensiune $n \times n$ în formă tridiagonală:

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & b_{n-1} & a_{n-1} & b_n \\ 0 & \cdots & 0 & b_n & a_n \end{bmatrix}$$

Dacă $b_2 = 0$ sau $b_n = 0$, atunci matricea A va avea o valoare proprie egală cu $a_1$, respectiv cu $a_n$. Ceea ce face metoda QR în cazul în care $b_2$ și $b_n$ sunt diferite de 0 este să scadă progresiv valorea lui $b_2$ sau a lui $b_n$ până devin aproximativ egale cu 0.

Când $b_j = 0$ pentru o valoare a lui $j$ care respectă condiția $2 < j < n$, problema poate fi redusă la rezolvarea a două probleme de dimensiune mai mică. ((a) și (b))

$$(a) \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b_{j-1} \\ 0 & \cdots & 0 & b_{j-1} & a_{j-1} \end{bmatrix} \qquad (b) \begin{bmatrix} a_j & b_{j+1} & 0 & \cdots & 0 \\ b_{j+1} & a_{j+1} & b_{j+2} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b_n \\ 0 & \cdots & 0 & b_n & a_n \end{bmatrix}$$

Dacă niciuna din valorile $b_j$ nu este egală cu 0, atunci metoda QR presupune formarea unei secvențe de matrici $A = A^{(1)}, A^{(2)}, A^{(3)}...$ după cum urmează:

1. $A^{(1)} = A$ este factorizată ca fiind $A^{(1)} = Q^{(1)}R^{(1)}$, unde $Q^{(1)}$ este o matrice ortogonală, iar $R^{(1)}$ este o matrice superior triunghiulară.

2. $A^{(2)} = R^{(1)}Q^{(1)}...$

În general, $A^{(i)}$ este factorizat ca fiind $A^{(i)} = Q^{(i)}R^{(i)}$, unde $Q^{(i)}$ este o matrice ortogonală, iar $R^{(i)}$ este o matrice superior triunghiulară. Apoi, $A^{(i+1)} = R^{(i)}Q^{(i)}$. Deoarece $Q^{(i)}$ este ortogonală, $R^{(i)} = {Q^{(i)}}^t A^{(i)}$ și $A^{(i+1)} = R^{(i)}Q^{(i)} = ({Q^{(i)}}^t A^{(i)})Q^{(i)} = {Q^{(i)}}^t A^{(i)} Q^{(i)}$.

Acest lucru ne asigură că $A^{(i+1)}$ este o matrice simetrică ce are aceleași valori proprii ca $A^{(i)}$ și având în vedere că inițial $A^{(1)} = A$, înseamnă că $A^{(i+1)}$ are aceleași valori proprii ca matricea A.
Din modul în care definim $R^{(i)}$ și $Q^{(i)}$, ne asigurăm că $A^{(i+1)}$ este o matrice tridiagonală.

### Matrice de rotație

Pentru a putea descrie construirea matricilor $Q^{(i)}$ și $R^{(i)}$, este necesară definirea noțiunii de *matrice de rotație*.

O *matrice de rotație* $P$ este diferită de matricea identitate în cel mult patru elemente. Aceste patru elemente sunt: $p_{ii} = p_{jj} = cos\Theta$ și $p_{ij} = -p_{ji} = sin\Theta$, pentru o valoare $\Theta$ și $i \neq j$.

Orice matrice de rotație $P$ este ortogonală pentru că definiția implică $PP^t = I$.

Pentru orice matrice de rotație $P$, matricea produs $AP$ este diferită de $A$ doar prin valorile din coloanele $i$ și $j$, în timp ce matricea produs $PA$ este diferită de $A$ doar prin valorile din liniile $i$ și $j$.

Pentru orice $i \neq j$, valoarea unghiului $\Theta$ poate fi aleasă astfel încât elementul $(PA)_{ij}$ să se anuleze.

## Problemă rezolvată 1

Să se determine matricea $P$ cu proprietatea că $PA$ are un element egal cu 0 în poziția $(2, 1)$
(linia 2, coloana 1).

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

*Soluție:* Forma lui $P$ este

$$\mathrm{P} \quad = \quad \begin{bmatrix} cos\Theta & sin\Theta & 0 \\ -sin\Theta & cos\Theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{\textit{așadar}} \quad \mathrm{PA} \quad = \quad \begin{bmatrix} 3cos\Theta + sin\Theta & cos\Theta + 3sin\Theta & sin\Theta \\ -3cos\Theta + cos\Theta & -sin\Theta + 3cos\Theta & cos\Theta \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

Unghiul $\Theta$ este ales astfel încât $-3sin\Theta + cos\Theta = 0$, ceea ce înseamnă că $tg\Theta = \frac{1}{3}$. Rezultă că:

$$cos\Theta = \frac{3\sqrt{10}}{10}.\ sin\Theta = \frac{\sqrt{10}}{10}.$$

$$PA \quad = \quad \begin{bmatrix} \frac{3\sqrt{10}}{10} & \frac{\sqrt{10}}{10} & 0 \\ -\frac{\sqrt{10}}{10} & \frac{3\sqrt{10}}{10} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad * \quad \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} \quad = \quad \begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & \frac{4\sqrt{10}}{5} & \frac{3\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} \tag{1}$$

*Observație!:* După cum putem observa din (1), matricea PA nu este nici simetrică, nici tridiagonală.

## Construcția lui Q și a lui R

Pentru a obține matricea $R^{(1)}$, matrice superior triunghiulară, sunt necesare mai multe matrici de rotație aplicate asupra matricii A.

$$R^{(1)} = P_n P_{n-1} ... P_2 A^{(1)}$$

Pentru început, construim matricea de rotație $P_2$ cu:

$$p_{11} = p_{22} = cos\Theta_2 \text{ și } p_{12} = -p_{21} = sin\Theta_2\text{, unde}$$

$$sin\Theta_2 = \frac{b_2}{\sqrt{{b_2}^2 + {a_1}^2}} \text{ și } cos\Theta_2 = \frac{a_1}{\sqrt{{b_2}^2 + {a_1}^2}}$$

Pentru verificare, vom calcula produsul:

$$(-sin\Theta_2)a_1 + (cos\Theta_2)b_2 = \frac{-b_2 a_1}{\sqrt{{b_2}^2 + {a_1}^2}} + \frac{a_1 b_2}{\sqrt{{b_2}^2 + {a_1}^2}} = 0$$

ceea ce înseamnă că elementul din poziția $(2,1)$ din matricea ${A_2}^{(1)} = P_2 A^{(1)}$ este egal cu 0. Înmulțirea lui $P_2$ cu $A^{(1)}$ modifică liniile 1 și 2, însă având în vedere că matricea $A^{(1)}$ este tridiagonală, doar valoarea elementului de indice (1,3) poate deveni diferit de 0 în matricea ${A_2}^{(1)}$.

În general, matricea $P_k$ este aleasă astfel încât elementul cu indicele (k, k-1) din ${A_k}^{(1)} = P_k {A_{k-1}}^{(1)}$ să fie 0. Ceea ce face ca elementul de indice $(k-1, k+1)$ să devină diferit de 0. După construirea tuturor matricilor de rotație $P_2, P_3, ...P_n$, putem de termina Q și R.

$$R^{(1)} = {A_n}^{(1)} = P_n P_{n-1} ... P_2 A$$

$$Q^{(1)} = {P_2}^t {P_3}^t ... {P_n}^t$$

Ortogonalitatea matricilor de rotație implică

$$Q^{(1)}R^{(1)} = ({P_2}^t {P_3}^t ... P_n^t)(P_n ... P_3 P_2)A^{(1)} = A^{(1)}$$

Matricea $Q^{(1)}$ este ortogonală deoarece:

$${Q^{(1)}}^t Q^{(1)} = ({P_2}^t {P_3}^t ... P_n^t)^t ({P_2}^t {P_3}^t ... P_n^t) = (P_n ... P_3 P_2)({P_2}^t {P_3}^t ... P_n^t) = I$$

## Problemă rezolvată 2

Determinați prima iterație a metodei QR asupra matricii A:

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

*Soluție:* $A^1 = A$ și $P_2$ reprezintă matricea de rotație determinată în cadrul problemei 1.

$$A_2{}^{(1)} = P_2 A^{(1)} \quad = \begin{bmatrix} \frac{3\sqrt{10}}{10} & \frac{\sqrt{10}}{10} & 0 \\ -\frac{\sqrt{10}}{10} & \frac{3\sqrt{10}}{10} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & \frac{4\sqrt{10}}{5} & \frac{3\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

În continuare,

$$sin\Theta_3 = \frac{1}{\sqrt{(1^2 + (\frac{4\sqrt{10}}{5})^2}} = 0.36761 \text{ și } cos\Theta_3 = \frac{\frac{4\sqrt{10}}{5}}{\sqrt{(1^2 + (\frac{4\sqrt{10}}{5})^2}} = 0.92998$$

Vom determina $R^{(1)} = A_3{}^{(1)} = P_3 A_2{}^{(1)}$ și $Q^{(1)} = {P_2}^t {P_3}^t$:

$$R^{(1)} \quad = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.92998 & 0.36761 \\ 0 & -0.36761 & 0.92998 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & \frac{4\sqrt{10}}{5} & \frac{3\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 2.7203 & 1.9851 \\ 0 & 0 & 2.4412 \end{bmatrix}$$

$$Q^{(1)} \quad = \begin{bmatrix} \frac{3\sqrt{10}}{10} & -\frac{\sqrt{10}}{10} & 0 \\ \frac{\sqrt{10}}{10} & \frac{3\sqrt{10}}{10} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.92998 & -0.36761 \\ 0 & 0.36761 & 0.92998 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.94868 & -0.29409 & 0.11625 \\ 0.31623 & 0.88226 & -0.34874 \\ 0 & 0.36761 & 0.92998 \end{bmatrix}$$

În consecință, $A^{(2)} = R^{(1)}Q^{(1)}$

$$A^{(2)} \quad = \begin{bmatrix} \sqrt{10} & \frac{3\sqrt{10}}{5} & \frac{\sqrt{10}}{10} \\ 0 & 2.7203 & 1.9851 \\ 0 & 0 & 2.4412 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 0.94868 & -0.29409 & 0.11625 \\ 0.31623 & 0.88226 & -0.34874 \\ 0 & 0.36761 & 0.92998 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.6 & 0.86024 & 0 \\ 0.86024 & 3.12973 & 0.89740 \\ 0 & 0.89740 & 2.27027 \end{bmatrix}$$

Elementele de sub diagonala principală din matricea $A^{(2)}$ sunt mai mici decât cele din matricea $A^{(1)}$ cu aproximativ 14%. Pentru a obține valori sub 0.001, vor fi necesare 13 iterații folosind algoritmul QR. După 13 iterații, vom obține:

$$A^{(13)} = \begin{bmatrix} 4.4139 & 0.01941 & 0 \\ 0.01941 & 3.0003 & 0.00095 \\ 0 & 0.00095 & 1.5858 \end{bmatrix}$$

Ceea ce înseamnă că am determinat aproximația unei valori proprii a matricii $A$, 1.5858 și că putem determina și celelalte două valori proprii calculând valorile proprii ale matricii reduse:

$$\begin{bmatrix} 4.4139 & 0.01941 \\ 0.01941 & 3.0003 \end{bmatrix}$$

### Accelerarea convergenței

Dacă valorile proprii ale matricii $A$ au module diferite: $|\lambda_1|\ \ |\lambda_2|\ \ ...\ \ |\lambda_n|$, rata de convergență a elementului ${b_{j+1}}^{(i+1)}$ către 0 în matricea $A^{(i+1)}$ depinde de raportul $\left|\frac{\lambda_{i+1}}{\lambda_i}\right|$. Convergența lui ${b_{j+1}}^{(i+1)}$ către 0 determină rata cu care elementul ${a_j}^{(i+1)}$ converge către valoarea proprie corespunzătoare $\lambda_j$.

Pentru a accelera convergența, vom implementa o tehnică de deplasare: Este aleasă o constantă $\sigma$, constantă apropiată de una din valorile proprii ale matricii $A$. În acest caz, factorizarea devine:

$$A^{(i)} - \sigma I = Q^{(i)} R^{(i)},$$

iar matricea $A^{(i+1)}$ este definită ca fiind:

$$A^{(i+1)} = R^{(i)} Q^{(i)} + \sigma I,$$

Cu această modificare, rata convergenței lui ${b_{j+1}}^{(i+1)}$ către 0 depinde de raportul $\left|\frac{\lambda_{i+1}-\sigma}{\lambda_i-\sigma}\right|$. Acest lucru poate aduce o îmbunătățire semnificativă asupra convergenței elementului ${a_j}^{(i+1)}$ către valoarea proprie corespunzătoare $\lambda_j$, în cazul în care $\sigma$ este mai apropiat de $\lambda_{j+1}$ decât de $\lambda_j$.

Vom schimba constanta $\sigma$ la fiecare pas, astfel încât atunci când $A$ are valorii proprii distincte în modul, ${b_n}^{(i+1)}$ să conveargă la 0 mai rapid decât oricare alt ${b_j}^{(i+1)}$, pentru orice j mai mic strict ca n.
Când ${b_n}^{(i+1)}$ este aproape 0, tragem concluzia că $\lambda_n$ este aproximativ egal cu ${a_n}^{(i+1)}$, după care eliminăm rândul $n$ și coloana $n$ și continuăm cu determinarea valorii proprii $\lambda_{n-1}$. Procesul se încheie în momentul în care am obținut câte o aproximare pentru fiecare valoare proprie a matricii $A$.

Tehnica de deplasare alege, la pasul $i$, constanta $\lambda_i$, unde $\lambda_{n-1}$ este valoarea proprie cea mai apropiată de ${a_n}^{(i)}$ a matricii $E^{(i)}$:

$$E^{(i)} = \begin{bmatrix} {a_{n-1}}^{(i)} & {b_n}^{(i)} \\ {b_n}^{(i)} & {a_n}^{(i)} \end{bmatrix}$$

## Problemă rezolvată 3

Aplicați metoda QR cu deplasare asupra matricii A:

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

*Soluție:* Pentru a determina factorul de accelerare $\sigma_1$ trebuie să determinăm valorile proprii ale matricii

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$$

care sunt $\mu_1 = 4$ și $\mu_2 = 2$. Cum ambele valori sunt la fel de depărtate de valoarea lui $a_3{}^{(1)}$ alegem o valoare la întâmplare, $\mu_2 = 2 = \sigma_1$.

$$A^{(i)} - \sigma_1 I = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Continuăm cu determinarea lui $A_2{}^{(1)}$ ca în cazul algoritmului fără deplasare:

$$A_2{}^{(1)} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Determinăm $R^{(1)} = A_3{}^{(1)}$

$$R^{(1)} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

și $A_2{}^{(1)} = R^{(1)} Q^{(1)} =$

$$A_2{}^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Am terminat o iterație a algoritmului QR. Nici $b_2{}^{(2)} = \frac{\sqrt{2}}{2}$, nici $b_3{}^{(2)} = -\frac{\sqrt{2}}{2}$ nu sunt suficient de apropiate de 0, așa că vom calcula și pasul următor al algoritmului QR. De data asta, determinăm valorile proprii $\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{3}$ ale matricii:

$$\begin{bmatrix} 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Determinăm cea mai apropiată valoare proprie de $a_3{}^{(2)} = 0$. Rezultă $\sigma_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{3}$.

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 2.6720277 & 0.37597448 & 0 \\ 0.37597448 & 1.4736080 & 0.030396964 \\ 0 & 0.030396964 & -0.047559530 \end{bmatrix}$$

Dacă $b_3{}^{(2)} = 0.030396964$ este suficient de apropiat de 0, atunci aproximația valorii proprii $\lambda_3$ este 1.5864151, suma dintre $a_3{}^{(3)}$ și $\sigma_1 + \sigma_2 = 2 + \frac{1-\sqrt{3}}{2}$.
Ștergem a treia linie și a treia coloană din $A^{(3)}$ și devine:

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 2.6720277 & 0.37597448 \\ 0.37597448 & 1.4736080 \\ 0 & 0.030396964 \end{bmatrix}$$

cu valorile proprii $\mu_1$=2.7802140 și $\mu_2$=1.3654218. Deci $\sigma_1 \approx 4.4141886$ și $\sigma_2 = 2.9993964$.

Valorile proprii obținute în acest caz, după două iterații, sunt 4.41420, 3.00000, and 1.58579, ceea ce demostrează că algoritmul QR cu deplasare oferă precizie bună și în cazul unui număr mic de iterații.

# Probleme propuse

# Problema 1

Implementați în OCTAVE algoritmul QR pentru determinarea valorilor proprii a unei matrici simetrice.

*Date de intrare:*

- n-dimensiunea matricii
- ${a_1}^{(1)}$, ${a_2}^{(1)}$, ..., ${a_n}^{(1)}$
- ${b_2}^{(1)}$, ${b_3}^{(1)}$, ..., ${b_n}^{(1)}$
- tol-toleranța acceptată
- maxiter-numărul maxim de iterații

*Date de ieșire:*

- valorile proprii ale matricii A sau
- un mesaj de eroare în cazul în care a fos depășit *maxiter*

# Problema 2

Determinați primele două iterații ale algoritmului QR pentru următoarele matrici:

$$(a)\quad \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad (b)\quad \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \end{bmatrix} (c)\quad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \quad (d)\quad \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -3 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

# Problema 3

Folosind algoritmul QR cu deplasare, determinați valorile proprii ale matricilor de la *Problema* 2 cu o toleranță de $10^{-5}$.