Računanje unutarnjih svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora definitnih matričnih parova

Miloloža Pandur, Marija

Sveučilište u Zagrebu

PRIRODOSLOVNO - MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Marija Miloloža Pandur

RAČUNANJE UNUTARNJIH SVOJSTVENIH VRIJEDNOSTI I SVOJSTVENIH VEKTORA DEFINITNIH MATRIČNIH PAROVA

DOKTORSKI RAD

Zagreb, 2016.

University of Zagreb

FACULTY OF SCIENCE
DEPARTMENT OF MATHEMATICS

Marija Miloloža Pandur

COMPUTING INTERIOR EIGENVALUES AND CORRESPONDING EIGENVECTORS OF DEFINITE MATRIX PAIRS

DOCTORAL THESIS

Zagreb, 2016

Sveučilište u Zagrebu

PRIRODOSLOVNO - MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK

Marija Miloloža Pandur

RAČUNANJE UNUTARNJIH SVOJSTVENIH VRIJEDNOSTI I SVOJSTVENIH VEKTORA DEFINITNIH MATRIČNIH PAROVA

DOKTORSKI RAD

Mentori:
Dr. Krešimir Veselić, prof. emer., Sveučilište u Hagenu
dr.sc. Ninoslav Truhar, red. prof., Sveučilište u Osijeku

Zagreb, 2016.

University of Zagreb

FACULTY OF SCIENCE
DEPARTMENT OF MATHEMATICS

Marija Miloloža Pandur

COMPUTING INTERIOR EIGENVALUES AND CORRESPONDING EIGENVECTORS OF DEFINITE MATRIX PAIRS

DOCTORAL THESIS

Supervisors:
Dr. Krešimir Veselić, professor emeritus, University of Hagen
Dr. Ninoslav Truhar, full professor, University of Osijek
Zagreb, 2016

Mojim kćerima Sari i Klari

Zahvala

Na početku, želim se zahvaliti mentoru profesoru emeritusu Krešimiru Veseliću na poticanju tijekom izrade disertacije, na nesebičnoj pomoći i idejama u znanstvenom radu. Zahvaljujem mu se na prenesenom znanju, posvećenom vremenu i strpljenju.

Zahvaljujem se mentoru profesoru Ninoslavu Truharu na savjetima, poticanju i raspravama u znanstvenom radu.

Iskreno se zahvaljujem profesoru Danielu Kressneru na gostoprimstvu u Laussani, na prenesenom znanju i poticanju te kolegi Meiyue Shao na strpljivosti. Zahvalna sam im zbog našeg zajedničkog znanstvenog rada.

Zahvaljujem se docentima Tomislavu Maroševiću, Zoranu Tomljanoviću i Ivani Kuzmanović na pomoći i savjetima tijekom mog doktorskog studija. Iskreno se zahvaljujem kolegicama Suzani Miodragović i Ljiljani Primorac Gajčić te docentici Dragani Jankov Maširević, na svesrdnoj podršci i poticanju.

Zahvaljujem se svim zaposlenicima Odjela za matematiku Sveučilišta u Osijeku koji su na bilo koji način doprinijeli mom znanstvenom radu.

Iskreno se zahvaljujem profesorici Françoise Tisseur, profesoru Ren-Cang Liju, te kolegici Suzani Miodragović na proslijeđenim Matlab kodovima, te profesoru Krešimiru Veseliću na proslijeđenim kodovima u Pascalu. Time su mi uštedjeli mnogo vremena.

Tijekom izrade ove doktorske disertacije podršku i pomoć su mi pružili mnogi prijatelji i kolege čija imena nisam navela, a kojima sam neizmjerno zahvalna.

Ponajviše se zahvaljujem svome mužu Ivanu koji me je cijelo vrijeme poticao te mojim kćerima Sari i Klari koje su puštale mamu da "uči matematiku" i da "opet ide na kompjuter." Neizmjerno hvala mojim roditeljima Ružici i Anti, braći Hrvoju i Mateju, te Saneli i Mati koji su toliko puta čuvali moje kćeri.

Na kraju, zahvaljujem se dragom Bogu što je jedno iznimno teško razdoblje moga života završilo, puno neizvjesnosti i borbe. Kroz moj doktorski studij i izradu doktorske disertacije naučila sam da zaista "Sve ima svoje doba i svaki posao pod nebom svoje vrijeme" (Propovjednik 3,1).

Sažetak

Ključne riječi: indefinitan matrični par; definitan matrični par; definitan interval; definitan pomak; unutarnje svojstvene vrijednosti; svojstveni vektori; matrica prekondicioniranja; indefinitne PSD i BPSD metode; indefinitne LOPCG i LOBPCG metode.

U prvom dijelu ove disertacije predstavljamo nove algoritme koji za dani hermitski matrični par (A, B) ispituju je li on pozitivno definitan, u smislu da postoji realan broj λ_0 takav da je matrica $A - \lambda_0 B$ pozitivno definitna. Skup svih takvih λ_0 čini otvoreni interval koji zovemo definitan interval, a bilo koji takav λ_0 zovemo definitan pomak. Najjednostavniji algoritmi ispitivanja koje predlažemo temelje se na ispitivanju glavnih podmatrica reda 1 ili 2. Također razvijamo efikasniji algoritam ispitivanja potprostora uz pretpostavku indefinitnosti matrice B. Taj se algoritam temelji na iterativnom ispitivanju malih gusto popunjenih komprimiranih parova koji nastaju korištenjem test-potprostora malih dimenzija, a predlažemo i ubrzanje samog algoritma. Algoritam ispitivanja potprostora posebno je pogodan za velike rijetko popunjene vrpčaste matrične parove, a može se primijeniti u ispitivanju hiperbolnosti kvadratnog svojstvenog problema.

U drugom dijelu ove disertacije za dani pozitivno definitni matrični par (A, B) reda n s indefinitnom matricom B konstruiramo nove algoritme minimizacije traga funkcije $f(X) = X^H AX$ uz uvjet $X^H BX = \mathrm{diag}(I_{k_+}, -I_{k_-})$ gdje je $X \in \mathbb{C}^{n\times(k_+ + k_-)}$, $1 \le k_+ \le n_+$, $1 \le k_- \le n_-$ i (n_+, n_-, n_0) inercija matrice B. Predlažemo opći indefinitni algoritam, te razvijamo efikasne algoritme prekondicioniranih gradijentnih iteracija koje smo nazvali indefinitna m-shema. Stoga metode indefinitne m-sheme za dani pozitivno definitni par i jedan ili dva definitna pomaka (koji se mogu dobiti algoritmom ispitivanja potprostora) istovremeno računaju manji broj unutarnjih svojstvenih vrijednosti oko definitnog intervala i pridružene svojstvene vektore. Također, dajemo ideje kako računati manji broj svojstvenih vrijednosti oko bilo kojeg broja unutar rubova spektra, a izvan definitnog intervala, i pridruženih svojstvenih vektora, danog pozitivno definitnog matričnog para koristeći pozitivno definitnu matricu prekondicioniranja. Algoritmi su posebno pogodni za velike rijetko popunjene matrične parove.

Nizom numeričkih eksperimenata pokazujemo efikasnost samih algoritama ispitivanja i algoritama računanja unutarnjih svojstvenih vrijednosti i pridruženih svojstvenih vektora. Efikasnost naših metoda uspoređujemo s nekim postojećim metodama.

Summary

Keywords: indefinite matrix pair; definite matrix pair; definiteness interval; definitizing shift; inner eigenvalues; eigenvectors; preconditioner; indefinite PSD and BPSD methods; indefinite LOPCG and LOBPCG methods.

The generalized eigenvalue problem (GEP) for given matrices $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ is to find scalars λ and nonzero vectors $x \in \mathbb{C}^n$ such that

$$Ax = \lambda Bx. \tag{1}$$

The pair (λ, x) is called an eigenpair, λ is an eigenvalue and x corresponding eigenvector. GEP (1) where A and B are both Hermitian, or real symmetric, occurs in many applications of mathematics. Very important case is when B (and A) is positive definite (appearing, e.g., in the finite element discretization of self-adjoint and elliptic PDE-eigenvalue problem [25]). Another very important case is when B (and A) is indefinite, but the matrix pair (A, B) is *definite*, meaning, there exist real numbers α, β such that the matrix $\alpha A + \beta B$ is positive definite (appearing, e.g., in mechanics [83] and computational quantum chemistry [4]). Many theoretical properties (variational principles, perturbation theory, etc.) and eigenvalue solvers for Hermitian matrix are extended to definite matrix pairs [64, 79, 83]. A Hermitian matrix pair (A, B) is called *positive (negative) definite* if there exists a real λ_0 such that $A - \lambda_0 B$ is positive *(*negative*)* definite. The set of all such λ_0 is an open interval called *the definiteness interval* [83], and any such λ_0 will be called *definitizing shift*.

In the first part of this thesis we propose new algorithms for detecting definite Hermitian matrix pairs (A, B). The most simple algorithms we propose are based on testing the main submatrices of order 1 or 2. These algorithms do not have to give a final answer about (in)definiteness of the given pair, so we develop a more efficient subspace algorithm assuming B is indefinite. Our subspace algorithm for detecting definiteness is based on iterative testing of small full compressed matrix pairs formed using test-subspaces of small dimensions. It is generalization of the method of coordinate relaxation proposed in [36, Section 3.6]. We also propose acceleration of the subspace algorithm in a way that certain linear systems must be solved in every or in some iteration steps. If the matrix pair is definite, the subspace algorithm detects if it is positive or negative definite and returns one definitizing shift. The subspace algorithm is particulary suited for large, sparse and banded matrix pairs, and can be used in testing hyperbolicity of a Hermitian quadratic matrix polynomial. Numerical experiments are given which illustrate efficiency of several variants of our subspace algorithm and comparison is made with an arc algorithm [19, 17, 29].

In the second part of this thesis we are interested in solving partial positive definite GEP (1) where B (and A) is indefinite (both A and B can be singular). Specifically, we are interested in iterative algorithms which will compute a small number of eigenvalues closest to the definiteness interval and corresponding eigenvectors. These algorithms are based on trace minimization property [41, 49]: find the minimum of the trace of the function:

$$f(X) := X^H AX \text{ such that } X^H BX = \operatorname{diag}(I_{k_+}, -I_{k_-})$$

where $X \in \mathbb{C}^{n\times(k_+ + k_-)}$, $1 \le k_+ \le n_+$, $1 \le k_- \le n_-$ and (n_+, n_-, n_0) is the inertia of B. The class of algorithms we propose will be preconditioned gradient type iteration, suitable for large and sparse matrices, previously studied for the case with A and/or B are known to be positive definite (for a survey of preconditioned iterations see [3, 39]). In the recent paper [42] an indefinite variants of LOBPCG algorithm [40] were suggested. The authors of [42] were not aware of any other preconditioned eigenvalue solver tailored to definite matrix pairs with indefinite matrices. In this thesis we propose some new preconditioned eigenvalue solvers suitable for this case, which include truncated and extended versions of indefinite LOBPCG from [42]. Our algorithms use one or two definitizing shifts. For the truncated versions of indefinite LOBPCG, which we call *indefinite BPSD/A*, we derive a sharp convergence estimates. Since for the LOBPCG type algorithms there are still no sharp convergence estimates, estimates derived for BPSD/A type methods serve as an upper (non-sharp) convergence estimates. We also devise some possibilities of using our algorithms to compute a modest number of eigenvalues around *any spectral gap* of a definite matrix pair (A, B). Numerical experiments are given which illustrate efficiency and some limitations of our algorithms.

Sadržaj

Uvod

Generalizirani svojstveni problem (GSP) za dane matrice $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ sastoji se u traženju skalara λ i nenul vektora $x \in \mathbb{C}^n$ takvih da vrijedi

$$Ax = \lambda Bx. \tag{2}$$

Par (λ, x) zove se svojstveni par, λ je svojstvena vrijednost i x je pridruženi svojstveni vektor. GSP (2) gdje su obje matrice A i B hermitske ili realne simetrične, pojavljuju se u mnogim primjenama matematike. Vrlo je važan slučaj kada je B (i A) pozitivno definitna (takvi se pojavljuju npr. u diskretizaciji konačnim elementima svojstvenog problema samo-adjungiranog i eliptičkog parcijalno diferencijalnog operatora [25]). Drugi vrlo važan slučaj je kada je B (i A) indefinitna, ali je matrični par (A, B) *definitan*, u smislu, da postoje realni brojevi α, β takvi da je matrica $\alpha A + \beta B$ pozitivno definitna (takvi se pojavljuju npr. u mehanici [83] i računalnoj kvantnoj kemiji [4]).

Pozitivno (negativno) definitni matrični par (A, B) je par kompleksnih hermitskih ili realnih simetričnih kvadratnih matrica takvih da postoji realan broj λ_0 sa svojstvom da je $A - \lambda_0 B$ pozitivno (negativno) definitna. Skup svih takvih λ_0 čini otvoreni interval koji zovemo definitan interval, a bilo koji takav λ_0 zovemo definitan pomak. Takvi matrični parovi mogu se istovremeno dijagonalizirati transformacijom kongruencije te imaju realne svojstvene vrijednosti podijeljene u dva disjunktna podskupa definitnim intervalom.

Teorijska svojstva pozitivno definitnih matričnih parova se intenzivno istražuju. Mnoga teorijska svojstva (varijacijski principi, perturbacijska teorija, itd.) i metode za rješavanje svojstvenog problema jedne hermitske matrice su proširene na definitne matrične parove (v. npr. [64, 79, 83]). Stewart u svom radu iz 1979. daje minimaksne karakterizacije svojstvenih vrijednosti (Courant-Fisherov minmax princip). U radu [41] Kovač-Striko i Veselić 1995. dokazuju Cauchyjevo svojstvo ispreplitanja svojstvenih vrijednosti za glavne podmatrice, nadalje, daju karakterizaciju realnih simetričnih pozitivno definitnih matričnih parova preko minimizacije traga funkcije

$$f(X) = X^T AX \ \text{ uz uvjet } \ X^T BX = \operatorname{diag}(I_{k_+}, -I_{k_-}) \tag{3}$$

gdje je $X \in \mathbb{R}^{n\times(k_+ + k_-)}$, $k_+ \leq n_+$, $k_- \leq n_-$ te $(n_+, n_-, 0)$ inercija matrice B (teorem Ky-Fanovog tipa). Njihov rad proširuju 2012. X.Liang, R.-C.Li i Z.Bai [49] na hermitski slučaj, gdje je dopušteno da je B neinvertibilna i da je matrični par (A, B) singularan ($\det(A - \lambda B) = 0$ za sve kompleksne λ). Također, vrijede teoremi Wielandtovog tipa [55] (sup inf karakterizacija nekoliko svojstvenih vrijednosti). U svojoj doktorskoj disertaciji [36, Odjeljak 3.6] Keller je 1994. predložila metodu koordinatne relaksacije za ispitivanje definitnosti danog simetričnog matričnog para (A, B) koja se temelji na minimizaciji funkcije f iz (3) i to za $k_+ = k_- = 1$. Ukoliko je par definitan, njezina metoda računa rubove definitnog intervala. Miodragović je 2014. u svojoj disertaciji [53] predstavila relativne perturbacijske ocjene za rotaciju svojstvenih potprostora definitnih matričnih parova (A, B) s indefinitnim invertibilnim matricama A i B.

Ciljevi ovog istraživanja su:

- predložiti nove algoritme ispitivanja definitnosti danog hermitskog matričnog para;
- predložiti algoritme istovremenog računanja manjeg broja svojstvenih vrijednosti oko definitnog intervala i pridruženih svojstvenih vektora pozitivno definitnog matričnog para temeljenih na principu minimizacije traga;
- prilagoditi jednu klasu algoritama prekondicioniranih gradijentnih iteracija (koji djeluju u standardnom skalarnom produktu) na indefinitnu klasu algoritama prekondicioniranih gradijentnih iteracija (koji djeluju u indefinitnom skalarnom produktu);
- predložiti transformaciju danog definitnog para u pomoćni radi dobivanja svojstvenih vrijednosti oko proizvoljnog broja (eng. shift) unutar rubova spektra koristeći neki indefinitni algoritam predložen gore;
- poopćiti algoritme 4DBSD iz [67] i LOB4DPCG iz [5] koji istovremeno računaju nekoliko najmanjih pozitivnih svojstvenih vrijednosti i pridruženih svojstvenih vektora produktnog svojstvenog problema.

U prvom dijelu disertacije predlažemo nove algoritme koji za dani hermitski matrični par (A, B) ispituju je li on definitan ili nije. Najjednostavniji algoritmi ispitivanja koje predlažemo temelje se na ispitivanju dijagonalnih elemenata danog matričnog para, te na ispitivanju glavnih podmatrica reda 2. Ti algoritmi ne moraju dati konačan odgovor o (in)definitnosti para, pa razvijamo efikasniji algoritam potprostora uz pretpostavku indefinitnosti matrice B. Algoritam ispitivanja potprostora temelji se na iterativnom ispitivanju malih gusto popunjenih komprimiranih parova koji nastaju korištenjem test-potprostora malih dimenzija. Test-potprostori se iteriraju tako da osiguravaju određenu monotonost koja garantira završenje ispitivanja u konačno mnogo koraka. Algoritmom potprostora generaliziramo Kellerinu metodu koordinatne relaksacije tako što povećavamo dimenziju test-potprostora, a za provjeru definitnosti komprimiranog para na tom potprostoru koristimo Veselićev J-Jacobijev algoritam [82]. Ukoliko neki mali komprimirani par nije definitan, nije definitan ni zadani matrični par, a ukoliko jest, prelazi se na neki novi mali komprimirani par. Za provjeru npr. pozitivne definitnosti zadanog para ne moramo nužno odrediti definitni interval, nego u našoj iterativnoj metodi uzimajući sredinu μ trenutnog radnog intervala, tj. intervala koji je nastao presjekom svih do sada izračunatih definitnih intervala komprimiranih parova, provjeravamo je li $A - \mu B$ pozitivno definitna. Ako uvjet definitnosti vrijedi, par (A, B) je pozitivno definitan i μ je neki definitni pomak te zaustavljamo metodu, a ako nije, nastavljamo dalje s novim test-potprostorom. Ukoliko je par definitan, algoritam potprostora naznačuje je li on pozitivno ili negativno definitan. Također, predlažemo ubrzanje samog algoritma potprostora koje zahtjeva rješavanje linearnog sustava u svim ili samo nekim iteracijskim koracima. Algoritam potprostora je posebno pogodan za velike rijetko popunjene i vrpčaste matrične parove, a može se primijeniti u ispitivanju hiperbolnosti kvadratnog svojstvenog problema (v. Odjeljak 1.2.6) koji se pojavljuje npr. u mehanici.

U svrhu određivanja najmanjih ili najvećih svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora hermitskih matričnih parova najčešće se koristi metoda potencija, metoda inverznih iteracija, metoda najbržeg spusta/rasta, Lanczosova metoda, itd. Da bi se te metode ubrzale, koristi se prekondicioniranje. Postoji mnoštvo ruske literature o prekondicioniranju svojstvenog problema (usp. literaturu u [39]). Bradbury i Fletcher su 1966. predložili metode konjugiranih gradijenata (CG) za svojstveni problem, a od 1979. nastaju različite verzije istih. Ruhe i Wiberg su 1970.-tih koristili SOR i metode CG u traženju svojstvenih vrijednosti. Otprilike u isto vrijeme, kvantni kemičari, uključujući Davidsona, razvijaju korekcijske metode za njihove velike simetrične matrice [20]. Kasnije Scott prepoznaje da je Davidsonov pristup vrsta prekondicioniranja i 1986. poopćuje njegovu metodu. Sleijpen i van der Vorst 2000. u radu [77] razvijaju Jacobi-Davidsonovu metodu. Knyazev 1991. u radu [38] predlaže lokalno optimalnu metodu prekondicioniranih konjugiranih gradijenata (LOPCG) te 1998. njezinu blok verziju (LOBPCG) u radu [39]. Bai i Li 2012.-2013. predlažu algoritam LOBPCG tipa za matrični produkt [4, 5]. Taj je rad 2013. inspirirao rad Kressnera, Shaoa i mene koji poopćava njihovu metodu i koji radi s indefinitnim matricama [42]. Prekondicionirane metode, u odnosu na neprekondicionirane, se koriste u svojstvenim problemima ako se mogu konstruirati efikasne matrice prekondicioniranja te ako se traži mali broj svojstvenih vrijednosti i ujedno njihovi svojstveni vektori. Klasa mrežnih svojstvenih problema koji dolaze iz problema diskretizacije eliptičkog parcijalnog diferencijalnog operatora iz matematičke fizike su praktičan primjer klase svojstvenih problema u kojima su prekondicionirane metode već vrlo dobro razvijene (geometrijske i algebarske multigridne matrice prekondicioniranja).

Neki od postojećih algoritama za rješavanje definitnog djelomičnog ili potpunog generaliziranog svojstvenog problema (2) koji rade s indefinitnim skalarnim produktom induciranim s indefinitnom B su indefinitni Jacobijevi algoritmi [31, 82], metoda Rayleighjevog kvocijenta [45] i indefinitne Lanczosove metode [3, 45].

U drugom dijelu ove disertacije za dani pozitivno definitni matrični par (A, B) reda n s indefinitnom B konstruiramo nove algoritme minimizacije traga funkcije

$$f(X) = X^H AX \text{ uz uvjet } X^H BX = \mathrm{diag}(I_{k_+}, -I_{k_-}) \tag{4}$$

gdje je $X \in \mathbb{C}^{n\times(k_+ + k_-)}$, $1 \le k_+ \le n_+$, $1 \le k_- \le n_-$ te (n_+, n_-, n_0) inercija matrice B. Predlažemo iterativne algoritme koji računaju manji broj unutarnjih svojstvenih vrijednosti oko definitnog intervala i pridružene svojstvene vektore. Klasa algoritama koje predlažemo su prekondicionirane gradijentne iteracije, pogodne za velike rijetko popunjene matrične parove. Ti algoritmi su prethodno izvedeni za slučaj kada su A i/ili B pozitivno definitne (za pregled prekondicioniranih iteracija vidjeti [3, 39]). U nedavnom radu [42] je predložena indefinitna varijanta LOBPCG algoritma [40]. Autori rada [42] nisu upoznati niti s jednim drugim algoritmom koji koristi matricu prekondicioniranja za rješavanje svojstvenog problema definitnog matričnog para s indefinitnim matricama. Stoga u ovoj disertaciji predlažemo neke nove algoritme koji koriste matricu prekondicioniranja pogodne za naš slučaj, koji uključuju skraćene i proširene verzije indefinitnog LOBPCG-a iz [42]. Za jednostavnije metode dajemo konvergencijske teoreme i asimptotske ocjene brzine konvergencije.

Nizom numeričkih eksperimenata pokazujemo efikasnost samih algoritama ispitivanja i algoritama računanja unutarnjih svojstvenih vrijednosti i pridruženih svojstvenih vektora.

Doprinosi doktorske disertacije

1. Izveden je novi efikasan algoritam za ispitivanje je li dani par velikih rijetko popunjenih hermitskih matrica definitan ili nije. Obično se indefinitnost danog matričnog para otkrije nakon samo nekoliko iteracija. Ukoliko je dani matrični par definitan, algoritam vraća jedan definitan pomak. Također, predloženo je jednostavno ispitivanje definitnosti pomoću glavnih podmatrica reda 1 ili 2 koje može vrlo brzo ustanoviti indefinitnost danog matričnog para.

2. Predložen je opći indefinitan algoritam iz kojega se mogu izvesti specijalizirani algoritmi za određivanje manjeg broja unutarnjih svojstvenih vrijednosti i pridruženih svojstvenih vektora pozitivno definitnih matričnih parova.

3. Konstruirani su novi efikasni algoritmi za određivanje manjeg broja unutarnjih svojstvenih vrijednosti i pridruženih svojstvenih vektora pozitivno definitnih matričnih parova, koristeći prekondicionirane gradijentne iteracije s pozitivno definitnim matricama prekondicioniranja. Matrice prekondicioniranja zahtjevaju poznavanje barem

jednog definitnog pomaka. Također, predloženo je ubrzanje u vidu korištenja dvije matrice prekondicioniranja.

4. Gore opisani algoritmi primjenjuju se za ispitivanje hiperbolnosti kvadratnog svojstvenog problema, i u pozitivnom slučaju, na određivanje unutarnjih svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora.

Neki od predloženih algoritama u ovoj disertaciji nalaze se u člancima:

- D. Kressner, M. Miloloža Pandur, M. Shao, '*An indefinite variant of LOBPCG for definite matrix pencils*', Numer. Algorithms, 66(4):681-703, 2014.
- M. Miloloža Pandur, '*Preconditioned gradient iterations for the eigenproblem of definite matrix pairs*', poslan u časopis ETNA.

Pregled doktorskog rada po poglavljima

Prvo poglavlje naslovljeno „Pregled osnovne teorije” prezentira osnovne teorijske rezultate koji su teorijska podloga za izvođenje i razumijevanje novih algoritama koje predlažemo u nastavku disertacije. Neki teorijski rezultati su novi.

U drugom poglavlju naslovljenom „Ispitivanje definitnosti hermitskog matričnog para” predloženi su novi jednostavni algoritmi ispitivanja (in)definitnosti danog hermitskog matričnog para bazirani na ispitivanju glavnih podmatrica reda 1 ili reda 2. Oni su opisani u Odjeljku 2.2.1. U Odjeljku 2.2.2 predlažemo novi algoritam ispitivanja koji smo nazvali algoritam potprostora. Nizom numeričkih eksperimenata uspoređujemo efikasnost naših algoritama s tzv. lučnim algoritmom [19, 17, 29].

U trećem poglavlju naslovljenom „Računanje unutarnjih svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora definitnih matričnih parova” predlažemo algoritme koji za dani pozitivno definitni matrični par (A, B) reda n s indefinitnom B istovremeno računaju manji broj unutarnjih svojstvenih vrijednosti oko definitnog intervala i pridruženih svojstvenih vektora. Opći indefinitni algoritam predlažemo u Potpoglavlju 3.1, dok u Potpoglavlju 3.2 razvijamo efikasne algoritme prekondicioniranih gradijentnih iteracija koje smo nazvali indefinitna m-shema. Nadalje, specijaliziramo indefinitnu 3-shemu za produktni svojstveni problem u Potpoglavlju 3.3 te ga uspoređujemo s algoritmom LOB4DPCG [5]. Na kraju, u Potpoglavlju 3.4 dajemo ideje kako računati manji broj svojstvenih vrijednosti oko bilo kojeg broja unutar rubova spektra, a izvan definitnog intervala, i pridruženih svojstvenih vektora, danog pozitivno definitnog matričnog para koristeći pozitivno definitnu matricu prekondicioniranja. Numeričkim eksperimentima na kraju zadnja tri potpoglavlja ilustriramo efikasnost predloženih algoritama.

Oznake

U ovoj se disertaciji koriste sljedeće oznake:

$\|x\|_2$	euklidska norma vektora x;
$\|A\|_2$	spektralna norma matrice A;
$\kappa(A)$	uvjetovanost matrice A u spektralnoj normi;
$\|A\|_\infty$	maksimalna retčana norma matrice A;
$\mathbb{C}\,(\mathbb{R})$	skup kompleksnih (realnih) brojeva;
$\mathbb{C}^n\,(\mathbb{R}^n)$	skup kompleksnih (realnih) n-dimenzionalnih vektora;
$\mathbb{C}^{n\times p}\,(\mathbb{R}^{n\times p})$	skup kompleksnih (realnih) $n \times p$-dimenzionalnih matrica;
A^H	konjugirano transponirana matrica matrice A;
A^T	transponirana matrica matrice A;
$I\,(I_n)$	jedinična matrica (reda n);
$\mathrm{diag}\,\{\,\pm 1\,\}$	dijagonalna matrica s $\pm$ jedinicama na dijagonali nekim redom;
$\mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$	dijagonalna matrica s elementima $d_1, \ldots, d_n$ na dijagonali, tim redom;
$\mathrm{diag}(A, B)$	blok-dijagonalna matrica s blokovima A, B, tim redom;
$\mathrm{span}\, X$	prostor stupaca matrice X;
$\mathrm{rang} A$	rang matrice A;
a_{ij}, $A(i, j)$	(i, j)-ti element matrice A;
$A(:, j)$	j-ti stupac matrice A;
$A(i, :)$	i-ti redak matrice A;
$A(1 : i, 1 : j)$ i sl.	podmatrica matrice A nastala presjekom prvih i-redaka i prvih j-stupaca;
$\sigma(A)$	spektar, tj. skup svih svojstvenih vrijednosti matrice A;
$\sigma(A, B)$	spektar, tj. skup svih svojstvenih vrijednosti matričnog para (A, B);
$\lambda_{\min}\,(\lambda_{\max})$	najmanja (najveća) svojstvena vrijednost hermitske matrice A;
$\mathrm{tr}(A)$	trag matrice A;
$\mathsf{In}(B) := (n_+, n_-, n_0)$	inercija hermitske matrice B, tj. trojka koja sadrži broj pozitivnih, negativnih, i nul svojstvenih vrijednosti matrice B, tim redom;
$\mathsf{In}_+(B) := n_+$	broj pozitivnih svojstvenih vrijednosti hermitske matrice B;
$\mathsf{In}_-(B) := n_-$	broj negativnih svojstvenih vrijednosti hermitske matrice B;
$A \succ 0$	matrica A je pozitivno definitna;
$A \prec 0$	matrica A je negativno definitna.

Poglavlje 1

Pregled osnovne teorije

U ovom poglavlju dajemo pregled osnovnih teorijskih rezultata koji su teorijska podloga za izvođenje i razumijevanje algoritma ispitivanja definitnosti hermitskog matričnog para predloženog u Poglavlju 2 i algoritama računanja svojstvenih parova definitnih matričnih parova predloženih u Poglavlju 3. Neki teorijski rezultati su novi. U prvom potpoglavlju dajemo definiciju definitnosti hermitskog matričnog para preko Crawfordovog broja i razmatramo njegovu ulogu u numeričkim algoritmima. U drugom potpoglavlju koristimo karakterizaciju definitnog hermitskog matričnog para kao onog para kod kojeg postoji realna linearna kombinacija koja je pozitivno definitna, što ćemo nadalje koristiti kao definiciju definitnosti hermitskog matričnog para. Zatim u odjeljcima Potpoglavlja 1.2 navodimo osnovna svojstva definitnih matričnih parova koja karakteriziraju svojstvene vrijednosti i pridružene svojstvene vektore: istovremenu dijagonalizaciju, svojstvo ispreplitanja i princip minimizacije traga. Na kraju navodimo nekoliko izvora definitnih matričnih parova.

Podsjetimo se (v. npr. [64, 79]), dva matrična para (A_1, B_1) i (A_2, B_2) su *ekvivalentna* ako postoje invertibilne matrice E i F takve da vrijedi

$$A_2 = EA_1F, \quad B_2 = EB_1F.$$

Ako je (λ, x) svojstveni par od (A_1, B_1) tada je $(\lambda, F^{-1}x)$ svojstveni par od (A_2, B_2). Ukoliko je $E = F^H$ govorimo o *kongruentnosti matričnih parova* (A_1, B_1) i (A_2, B_2). Ako postoji invertibilna matrica F takva da

$$F^H AF = D_1, \quad F^H BF = D_2,$$

gdje su D_1 i D_2 dijagonalne, onda kažemo da matrica F *istovremeno dijagonalizira* matrični par (A, B), tj. da je (A, B) istovremeno dijagonalizibilan par. GSP (2) možemo zapisati kao

$$(A - \lambda B)x = 0, \quad \lambda \in \mathbb{C},\ 0 \neq x \in \mathbb{C}^n.$$

Polinom $\det(A - \lambda B)$ u kompleksnoj varijabli λ zove se *karakterističan polinom* para (A, B), stupnja je manjeg ili jednakog n (može biti i nul-polinom), a njegove nultočke su svojstvene vrijednosti para (A, B). Ako je B neinvertibilna, onda par (A, B) ima beskonačnu svojstvenu vrijednost. Ukoliko je $\det(A - \lambda B) = 0$ za sve $\lambda \in \mathbb{C}$ tada (A, B) zovemo *singularan matrični par*, u suprotnom (A, B) zovemo *regularan matrični par*. Singularni matrični parovi imaju čitav skup $\mathbb{C}$ za svoj spektar, dok regularni parovi imaju diskretan spektar s n elemenata (uključujući višekratnosti i moguće beskonačne svojstvene vrijednosti). Ako je barem jedna od matrica A, B invertibilna, onda je par (A, B) regularan. Za $A = \mathrm{diag}(a_1, \ldots, a_n)$ i $B = \mathrm{diag}(b_1, \ldots, b_n)$ su svojstvene vrijednosti para (A, B) dane s

$$\lambda_i := \frac{a_i}{b_i}, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Stoga je npr. par (A, B) zadan s

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

singularan par sa svojstvenim parovima $(\frac{4}{2}, [1, 0]^T)$ te $(\frac{0}{0}, [0, 1]^T)$ dok je par (C, D) zadan s

$$C = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

regularan par sa svojstvenim parovima $(\frac{4}{0}, [1, 0]^T)$ (beskonačna svojstvena vrijednost) te $(\frac{0}{2}, [0, 1]^T)$ (konačna svojstvena vrijednost).

Par matrica (A, B) je *hermitski matrični par* ako su obje matrice A i B hermitske istog reda n.

1.1 Crawfordov broj

Definicija 1.1 Neka je (A, B) hermitski matrični par reda n. Broj

$$\gamma(A, B) := \min_{\substack{x \in \mathbb{C}^n \\ \|x\|_2 = 1}} |x^H(A + iB)x| = \min_{\substack{x \in \mathbb{C}^n \\ \|x\|_2 = 1}} \sqrt{(x^H A x)^2 + (x^H B x)^2} \tag{1.1}$$

zove se *Crawfordov broj* para (A, B).

Crawfordov broj je uveden i istražen u [18],[80].

Definicija 1.2 Hermitski matrični par (A, B) je *definitan matrični par* ako je $\gamma(A, B) > 0$, inače, (tj. ako je $\gamma(A, B) = 0$) je *indefinitan matrični par*.

Dakle,

$$\gamma(A,B)=0 \iff \exists\, 0\neq x\in\mathbb{C}^n \text{ takav da } x^HAx=0 \text{ i } x^HBx=0.$$

Par (A,B) je indefinitan ako npr. matrice A i B imaju netrivijalan zajednički nulpotprostor (takav par je ujedno i singularan par) ili npr. ako za neki $i=1,\ldots,n$ vrijedi $a_{ii}=b_{ii}=0$ (takav par može i ne mora biti singularan par). Primjer jednog regularnog indefinitnog para je par (A,B) [79, Primjer VI.1.14] gdje je

$$A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix},\quad B=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}.$$

Vektor $x=[1,i]^T$ je takav da vrijedi $x^HAx=0$ i $x^HBx=0$. Štoviše, skup svih takvih vektora dan je s:

$$x=r[e^{i\varphi},e^{i(\varphi+\frac{\pi}{2}+k\pi)}]^T,\ r\geq 0,\ \varphi\in\mathbb{R},\ k\in\mathbb{Z}.$$

Ukoliko je barem jedna od hermitskih matrica A,B pozitivno ili negativno definitna, par (A,B) je definitan par (v. npr. [79, Teorem VI.1.15]). Neka je, BSO, B hermitski pozitivno definitna i neka je $B^{\frac{1}{2}}$ hermitski pozitivno definitni kvadratni korijen od B. Tada je hermitski par (A,B) ekvivalentan paru $(B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}},I)$, pa ima realne svojstvene vrijednosti jer je $B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}}$ hermitska. Neka je $B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}}=UDU^H$ spektralna dekompozicija hermitske matrice $B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}}$ (D je realna i dijagonalna). Tada za $X=B^{-\frac{1}{2}}U$ vrijedi $X^HBX=I$ i $X^HAX=D$. Dakle, par (A,B) u kojem je B pozitivno definitna je istovremeno dijagonalizibilan par s realnim svojstvenim vrijednostima.

No, postojanje realne linearne kombinacije hermitskih matrica A i B koja je definitna jest ono što karakterizira definitan par, kao što pokazuje sljedeći teorem ([80], [79, Teorem VI.1.18]):

Teorem 1.3 (Stewart, 1979) Neka je (A,B) definitan par, i za $\phi\in\mathbb{R}$ definirajmo

$$\begin{aligned}A_\phi &:= A\cos\phi + B\sin\phi,\\ B_\phi &:= -A\sin\phi + B\cos\phi.\end{aligned}$$

Tada postoji $\phi\in[0,2\pi\rangle$ takav da je B_ϕ pozitivno definitna i

$$\gamma(A,B)=\lambda_{\min}(B_\phi).$$

$\diamond$

Kako je $A_\phi+iB_\phi=e^{-i\phi}(A+iB)$, to odmah iz Definicije 1.1 slijedi da se rotacijom para (A,B) ne mijenja njegov Crawfordov broj. Stoga vrijedi

Napomena 1.4 Hermitski matrični par (A,B) je definitan ako i samo ako postoje realni brojevi α, β takvi da je $\alpha A+\beta B$ pozitivno definitna matrica. U sljedećim ćemo poglavljima ovo uzimati kao definiciju definitnosti para.

Tek 1999. su Cheng i Higham u radu [16] riješili problem kako odrediti kut ϕ iz Teorema 1.3. U tom su radu pokazali da se Crawfordov broj definitnog para može zapisati kao globalni minimizacijski problem jedne varijable [16, Teorem 2.1], odnosno da za Crawfordov broj proizvoljnog hermitskog para vrijedi [33, Odjeljak 2.2]:

$$\gamma(A, B) = -\min\left(\min_{0\leq\theta\leq 2\pi} \lambda_{\max}(A\cos\theta + B\sin\theta), 0\right) \tag{1.2a}$$

$$= \max\left(\max_{0\leq\theta\leq 2\pi} \lambda_{\min}(A\cos\theta + B\sin\theta), 0\right). \tag{1.2b}$$

Neka je za definitan par, ψ točka u kojoj se dostiže minimum u (1.2a), tada je traženi ϕ iz Teorema 1.3 jednak: $\phi := \pi/2 + \psi$. Nažalost, funkcija $\theta \mapsto \lambda_{\max}(A\cos\theta + B\sin\theta)$ može imati mnogo lokalnih minimuma, a standardne numeričke metode ne osiguravaju pronalazak globalnog minimuma. Također, potrebno je koristiti efikasnu metodu za određivanje najveće svojstvene vrijednosti hermitske matrice $A\cos\theta + B\sin\theta$. No, 2009. su Guo, Higham i Tisseur u radu [29] pokazali kako se globalni nekonkavni problem maksimizacije (1.2b) na intervalu duljine 2π može pojednostaviti na jedan kvazikonkavan na manjem intervalu, duljine ne veće od π, koji se može jednostavnije numerički riješiti (npr. primijenjujući kombinacije potrage zlatnog reza i paraboličke interpolacije).

Iz Teorema 1.3 slijedi da se svaki definitan par (A, B) može rotirati u par (A_ϕ, B_ϕ) u kojemu je B_ϕ pozitivno definitna. Za svojstvene vrijednosti, u homogenim koordinatama[1], (α, β) para (A, B) i svojstvene vrijednosti $(\alpha_\phi, \beta_\phi)$ para (A_ϕ, B_ϕ) vrijedi

$$\begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_\phi \\ \alpha_\phi \end{bmatrix}. \tag{1.3}$$

Svojstveni vektori rotacijom ostaju isti. Stoga slijedi da su definitni parovi regularni s realnim svojstvenim vrijednostima i istovremeno dijagonalizibilni [79, Korolar VI.1.19].

Prirodno se postavlja pitanje, ako znamo da je par definitan, je li za numeričko rješavanje pridruženog generaliziranog svojstvenog problema potrebno rotirati taj par u (A_ϕ, B_ϕ) u kojemu je B_ϕ pozitivno definitna ili raditi s danim matricama A i B? Odgovor je i da i ne. Navodimo dva razloga u korist rotiranja danog matričnog para (v. [16]). Ako je B_ϕ pozitivno definitna, onda koristeći njezinu dekompoziciju Choleskog: $B_\phi = LL^H$, generalizirani svojstveni problem para (A_ϕ, B_ϕ) prevodimo u običan hermitski svojstveni problem za matricu $C = L^{-1}A_\phi L^{-H}$. Ta se redukcija može napraviti eksplicitno i implicitno [64, Poglavlje 15]. Analiza grešaka u tvorbi matrice C povlači da su izračunate svojstvene vrijednosti, u najboljem slučaju, jednake egzaktnim svojstvenim vrijednostima

[1] U homogenim koordinatama, par $(\alpha, \beta) \in \mathbb{C}^2$ je svojstvena vrijednost matričnog para (A, B) ako je $\det(\beta A - \alpha B) = 0$. Također, za $(c\alpha, c\beta)$, $0 \neq c \in \mathbb{C}$ govorimo o istoj svojstvenoj vrijednosti.

perturbirane matrice $C+\Delta C$, gdje $\|\Delta C\|_2 \leq \epsilon \|A_\phi\|_2 \lambda_{\min}(B_\phi)^{-1}$, gdje je ϵ jedinična greška zaokruživanja. Pa bi razumna strategija za povećanje točnosti izračunatih svojstvenih vrijednosti bila da se minimizira $\|A_\phi\|_2 \lambda_{\min}(B_\phi)^{-1}$, odnosno jednostavnije, da se maksimizira $\lambda_{\min}(B_\phi)$, čija je maksimalna vrijednost $\gamma(A,B)$ (v. (1.2b)). Nadalje, čak i ako je početna B bila pozitivno definitna, radi točnosti isplati se rješavati rotirani generalizirani svojstveni problem ako je $\gamma(A,B) = \lambda_{\min}(B_\phi) \gg \lambda_{\min}(B)(\approx 0)$ [16, Odjeljak 4, Primjer 3]. Sada ćemo nabrojati nekoliko razloga zašto nije dobro rotirati dani matrični par u matrični par iz Teorema 1.3. Može se pojaviti gubitak točnosti u značajnim znamenkama (usp. [16, Poglavlje 4, Primjer 3]) zbog moguće loše kondicionirane transformacije (1.3). Također, ukoliko je Crawfordov broj jako mali (pa njegovo računanje može biti značajno usporeno), ne isplati se rotirati par jer nećemo moći dobiti povećanje točnosti (bilo koja rotirana pozitivno definitna B_ϕ će imati sitnu najmanju svojstvenu vrijednost). U ovom slučaju bi možda moglo pomoći određivanje takvog kuta ϕ za koji pripadna B_ϕ ima najmanju kondiciju $\lambda_{\max}(B_\phi)/\lambda_{\min}(B_\phi)$ [65]. Kao što ćemo vidjeti u nastavku, jako mali Crawfordov broj, upućuje na to da je dani definitan par blizu indefinitnog i da mala perturbacija matričnih elemenata može narušiti njegovu definitnost pa je potrebno imati općenitije numeričke metode. Ukoliko matrice A, B imaju određenu strukturu, rotacija para (A,B) može narušiti tu strukturu. Ako su matrice A, B zaista jako velike, korištenje faktorizacije može biti neefikasno, a i samo računanje Crawfordovog broja je otežano. Dakle, nužno je razvijati algoritme koji će raditi s danim definitnim matričnim parom ne reducirajući ga na standardni hermitski svojstveni problem. Na sreću, takvi algoritmi nastaju kao prirodna proširenja numeričkih algoritama za običan svojstveni problem (ne nužno hermitski). U prvom redu su se razvijali algoritmi za definitan matrični par u kojemu je definitnost trivijalna (npr. jedna matrica je pozitivno definitna), a onda i algoritmi u kojima su obje matrice indefinitne.

Higham, Tisseur i Van Dooren su 2002. u radu [33] definirali udaljenost matričnog para do najbližeg indefinitnog para i pokazali da je ta udaljenost upravo jednaka Crawfordovom broju toga para. Udaljenost su definirali na sljedeći način:

$$d(A,B) := \min\{\|[\Delta A\, \Delta B]\|_2 : x^H(A+\Delta A + i(B+\Delta B))x = 0, \text{za neki } x \neq 0\}, \quad (1.4)$$

gdje su perturbacije $\Delta A, \Delta B$ hermitske. Dakle vrijedi [33, Teorem 2.2]:

$$d(A,B) = \gamma(A,B). \quad (1.5)$$

Također su razvili algoritam bisekcije za određivanje Crawfordovog broja (koji ujedno služi i kao algoritam za ispitivanje definitnosti danog para). Ukoliko je Crawfordov broj reda veličine jedinična greška zaokruživanja puta neka norma od (A,B), ne može se očekivati da će se uspjeti ispitati definitnost u aritmetici konačne preciznosti, jer iz (1.5) slijedi da greške zaokruživanja mogu promijeniti definitnost para.

1.2 Definitni matrični parovi

U ovom potpoglavlju dajemo definiciju definitnih matričnih parova i navodimo njihova osnovna svojstva koja su nam potrebna za razumijevanje teorijske podloge za algoritme koje razvijamo u Poglavlju 2 i Poglavlju 3.

Definicija 1.5 Hermitski matrični par (A, B) je *definitan matrični par* ako postoje realni brojevi α, β takvi da je

$$\alpha A + \beta B \succ 0. \tag{1.6}$$

U suprotnom kažemo da je matrični par (A, B) *indefinitan matrični par*.

Definicija 1.6 Hermitski matrični par (A, B) je *pozitivno (negativno) definitan matrični par* ako postoji realan broj λ_0 takav da je $A - \lambda_0 B$ pozitivno (negativno) definitna matrica.

Definicija 1.7 Hermitski matrični par (A, B) je *pozitivno (negativno) semidefinitan matrični par* ako postoji realan broj λ_0 takav da je $A - \lambda_0 B$ pozitivno (negativno) semidefinitna matrica.

Primjer 1.8 Neka su A, B hermitske matrice podijeljene po blokovima:

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^H & A_{22} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

s odgovarajućim blokovima istog reda. Da bi par (A, B) bio pozitivno definitan nužno je i dovoljno da je $A_{22} \succ 0$. Naime na matrici

$$A - \lambda B = \begin{bmatrix} A_{11} - \lambda I & A_{12} \\ A_{12}^H & A_{22} \end{bmatrix}$$

primjenimo blok Gaussovu eliminaciju i dobivamo matricu

$$\begin{bmatrix} A_{11} - \lambda I & 0 \\ 0 & A_{22} - A_{12}^H (A_{11} - \lambda I)^{-1} A_{12} \end{bmatrix}.$$

Za λ dovoljno negativno će obje matrice $A_{11} - \lambda I$ i $A_{22} - A_{12}^H (A_{11} - \lambda I)^{-1} A_{12}$ biti pozitivno definitne, pa će i (A, B) biti pozitivno definitan par. $\diamond$

1.2.1 Istovremena dijagonalizacija definitnog para

Jedno od osnovnih svojstava definitnih matričnih parova jest da se mogu istovremeno dijagonalizirati transformacijom kongruencije.

Teorem 1.9 ([43, 49]) Neka je (A, B) pozitivno definitan matrični par reda n takav da B ima inerciju $\mathsf{In}(B) = (n_+, n_-, n_0)$.

1. Tada postoji invertibilna matrica W takva da

$$W^H AW - \lambda W^H BW = \begin{bmatrix} \Lambda_+ & & \\ & -\Lambda_- & \\ & & I_{n_0} \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} I_{n_+} & & \\ & -I_{n_-} & \\ & & 0_{n_0} \end{bmatrix}, \tag{1.7}$$

gdje $\Lambda_+ = \mathrm{diag}(\lambda_1^+, \ldots, \lambda_{n_+}^+)$, $\Lambda_- = \mathrm{diag}(\lambda_1^-, \ldots, \lambda_{n_-}^-)$ s

$$\lambda_{n_-}^- \leq \cdots \leq \lambda_1^- < \lambda_1^+ \leq \cdots \leq \lambda_{n_+}^+. \tag{1.8}$$

2. Sve konačne svojstvene vrijednosti para (A, B) su realne i ima ih $r = \mathrm{rang}(B) = n_- + n_+$ te su dane u matricama Λ_- i Λ_+. Svaka svojstvena vrijednost λ_j^- ima svojstveni vektor x takav da je $x^H Bx = -1$, dok svaka svojstvena vrijednost λ_j^+ ima svojstveni vektor x takav da je $x^H Bx = 1$.

3. Par (A, B) je pozitivno definitan ako i samo ako je $\lambda_1^- < \lambda_1^+$. U tom slučaju je $\{\lambda_0 \in \mathbb{R} : A - \lambda_0 B \succ 0\} = \langle \lambda_1^-, \lambda_1^+ \rangle$.

4. Neka je $\mu = (\lambda_1^- + \lambda_1^+)/2$. Za $\lambda > \mu$, neka $\mathfrak{n}(\lambda)$ označava broj svojstvenih vrijednosti para (A, B) u $[\mu, \lambda\rangle$. Za $\lambda < \mu$, neka $\mathfrak{n}(\lambda)$ označava broj svojstvenih vrijednosti para (A, B) u $\langle \lambda, \mu]$. Tada
$$\mathfrak{n}(\lambda) = \mathsf{In}_-(A - \lambda B).$$

$\diamond$

Iz točke 3. Teorema 1.9 slijedi sljedeća defininicija.

Definicija 1.10 Neka je $A - \lambda_0 B \succ 0$ gdje je (A, B) hermitski matrični par. Skup svih takvih brojeva λ_0 čini otvoreni interval koji zovemo *definitan interval* [83], a bilo koji takav broj λ_0 zovemo *definitan pomak*.

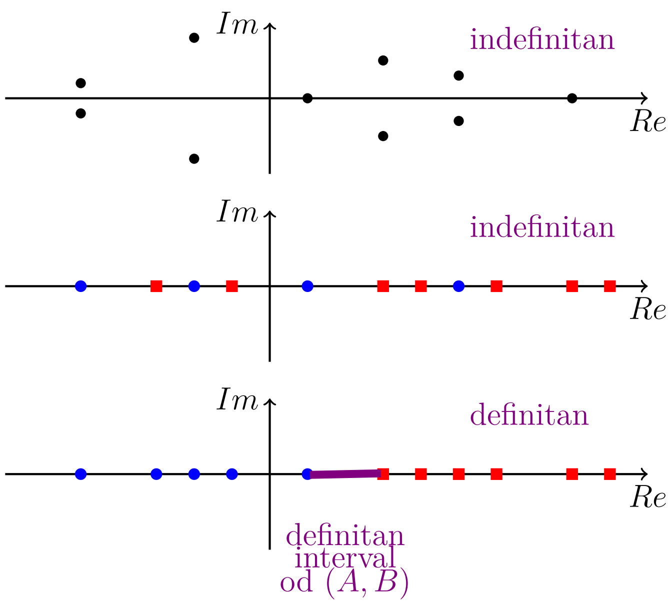
Napomena 1.11 Neka je matrični par (A, B) definitan. Ukoliko je u (1.6) $\alpha \neq 0$ tada je (A, B) ili pozitivno ili negativno definitan par s definitnim pomakom $\lambda_0 = -\frac{\beta}{\alpha}$, dok ukoliko je $\alpha = 0$ tada $\beta \neq 0$ pa je B ili pozitivno ili negativno definitna matrica. Ako je par (A, B) pozitivno definitan tada je par $(-A, B)$ negativno definitan, pa ćemo u ostatku potpoglavlja dati svojstva samo za pozitivno definitne matrične parove.

Definicija 1.12 Neka je $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitska matrica. Vektor $x \in \mathbb{C}^n$ zovemo *B-pozitivan*, *B-negativan*, *B-neutralan*, *B-normiran* ako $x^H Bx > 0$, $x^H Bx < 0$, $x^H Bx = 0$, $|x^H Bx| = 1$ tim redom. Skup vektora $\{\, x_1, \ldots, x_p \,\}$ je *B-ortogonalan* ako je $x_j^H Bx_i = 0$ za $i \neq j$, a *B-ortonormiran* ako je $|x_j^H Bx_i| = \delta_{ij}$, gdje je δ_{ij} Kroneckerov delta simbol. Potprostor $S \leq \mathbb{C}^n$ je *B-pozitivan*, *B-negativan*, ako su svi nenul vektori $x \in S$ B-pozitivni, B-negativni, tim redom.

Napomenimo da je skup B-ortonormiranih vektora linearno nezavisan.

Kako su stupci matrice W iz (1.7) svojstveni vektori para (A, B), iz (1.7) slijedi da je svojstveni vektor x koji pripada bilo kojoj svojstvenoj vrijednosti $\lambda_1^+, \ldots, \lambda_{n_+}^+$ ($\lambda_1^-, \ldots, \lambda_{n_-}^-$) B-pozitivan (B-negativan) pa takve svojstvene vrijednosti zovemo B-*pozitivne* (B-*negativne*). Posebno, bilo koji svojstveni vektor x koji pripada konačnoj svojstvenoj vrijednosti od (A, B) ne može biti B-neutralan. Zbog toga je uvijek moguće normirati x tako da $|x^H Bx| = 1$. Štoviše, svojstveni vektori koji pripadaju različitim svojstvenim vrijednostima su B-ortogonalni.

Konačan dio spektra regularnog hermitskog matričnog para (A, B) u kompleksnoj ravnini možemo skicirati na jedan od sljedeća tri načina (na 2. i 3. skici su npr. B-pozitivne svojstvene vrijednosti označene s ■, dok su B-negativne svojstvene vrijednosti označene s •):



Samo u slučaju konačnih realnih svojstvenih vrijednosti kod kojih B-predznaci nisu pomiješani je dani matrični par (A, B) definitan (3. skica).

Napomena 1.13 Za invertibilnu hermitsku matricu B reda n njena hermitska indefinitna dekompozicija dana je s

$$B = GJG^H, \quad J = \mathrm{diag}(I_m, -I_{n-m})$$

gdje je G donje trokutasta s dijagonalnim blokovima reda 1 ili 2 (npr. [14, 11, 13] i [75]). Tada za $0 \neq x \in \mathbb{C}^n$ imamo

$$\begin{aligned} x^H Bx = x^H GJG^H x = (G^H x)^H J(G^H x) = & \qquad (y := G^H x) \\ = y^H Jy = |y_1|^2 + \ldots + |y_m|^2 - |y_{m+1}|^2 - \ldots - |y_n|^2. & \end{aligned} \tag{1.9}$$

Ukoliko izaberemo proizvoljni $0 \neq y \in \mathbb{C}^n$ takav da vrijedi $y^H J y > 0$ u (1.9) tada rješavajući linearni sustav $G^H x = y$ dobivamo B-pozitivan vektor x. Rješavanje toga sustava zahtjeva općenito $O(n^2)$ računskih operacija, a samo $O(n)$ ukoliko je B vrpčasta.$\diamond$

Primjer 1.14 Hermitski matrični par (A, B) reda 2 gdje su

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

je negativno definitan par. Naime, svojstvene vrijednosti para (A, B) su 1 i $-\infty$, dok su svojstvene vrijednosti matrice $A - \lambda B$ jednake $1 - \lambda$ i -1 pa je za sve $\lambda > 1$ matrica $A - \lambda B$ negativno definitna. Definitni interval para (A, B) je dakle neograničen: $\langle 1, +\infty \rangle$. $\diamond$

Primjer 1.15 Hermitski matrični par (A, B) reda 2 gdje su

$$A = \begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

je i pozitivno i negativno definitan par jer je B definitna matrica. Naime, svojstvene vrijednosti para (A, B) su 2 i -1, dok su svojstvene vrijednosti matrice $A - \lambda B$ jednake $8 - 4\lambda$ i $-1 - \lambda$ pa je za sve $\lambda < -1$ matrica $A - \lambda B$ pozitivno definitna, dok je za sve $\lambda > 2$ matrica $A - \lambda B$ negativno definitna. No, uočimo da je par (B, A) isključivo pozitivno definitan s definitnim intervalom $\langle -1, 1/2 \rangle$. $\diamond$

Ukoliko matrica B nije definitna, par (A, B) ne može istovremeno biti i pozitivno i negativno definitan par. Pogledajmo sljedeći primjer s indefinitnom matricom B.

Primjer 1.16 Neka su zadane realne simetrične matrice $A = \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}$, $B = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$. Nužan uvjet za definitnost para (A, B) je $a \cdot c > 0$ jer onda par (A, B) ima dvije različite realne svojstvene vrijednosti koje čine rubove definitnog intervala:

$$\langle b - \sqrt{ac}, b + \sqrt{ac} \rangle.$$

Nužan i dovoljan uvjet za pozitivnu definitnost para (A, B) je $a > 0$ i $c > 0$ (uz gornji uvjet, pozitivna definitnost matrice $A - \lambda B$, za dane A, B povlači da dijagonalni elementi moraju biti pozitivni). Slično vrijedi za negativnu definitnost para. $\diamond$

1.2.2 Rayleighjev kvocijent i minmax karakterizacija svojstvenih vrijednosti

Definicija 1.17 Neka su A, B hermitske matrice reda n. Funkciju

$$\rho : \{\, x \in \mathbb{C}^n : x^H B x \neq 0 \,\} \to \mathbb{R}$$

definiranu s

$$\rho(x;A,B) := \frac{x^H Ax}{x^H Bx} \tag{1.10}$$

zovemo *Rayleighjev kvocijent para* (A, B), dok sam broj $\rho(x; A, B)$ zovemo *Rayleighjev kvocijent vektora* x za dani par (A, B). Koristit ćemo kraću oznaku $\rho(x)$ ukoliko je jasno na koji se par (A, B) misli.

Uočimo, ukoliko je (λ, x) svojstveni par para (A, B), tada je $\rho(x) = \lambda$, tj. Rayleighjev kvocijent svojstvenog vektora jednak je pripadnoj svojstvenoj vrijednosti. Courant-Fisherov minmax princip karakterizira svojstvene vrijednosti hermitskih matričnih parova pomoću Rayleighjevog kvocijenta te je poopćenje te karakterizacije za običan hermitski svojstveni problem. Navodimo teorem (u našim oznakama) koji vrijedi za pozitivno definitne matrične parove s invertibilnom indefinitnom matricom B.

Teorem 1.18 ([45, Kor.3.2] Courant-Fisherov minmax princip) Neka je (A, B) pozitivno definitan par reda n s invertibilnom matricom B, i neka su mu svojstvene vrijednosti poredane kao u (1.8) te neka S_i označava potprostor od $\mathbb{C}^n$. Tada vrijedi

$$\lambda^-_{n_-+1-i} = \inf_{\dim S_i = n_+ + i} \; \sup_{\substack{x \in S_i \\ x^H Bx < 0}} \frac{x^H Ax}{x^H Bx}, \qquad i = 1, \ldots, n_-,$$

$$\lambda^+_j = \sup_{\dim S_j = n+1-j} \; \inf_{\substack{x \in S_j \\ x^H Bx > 0}} \frac{x^H Ax}{x^H Bx}, \qquad j = 1, \ldots, n_+.$$

Posebno,

$$\lambda^-_1 = \max_{x^H Bx<0} \frac{x^H Ax}{x^H Bx}, \qquad \lambda^+_1 = \min_{x^H Bx>0} \frac{x^H Ax}{x^H Bx}. \tag{1.11}$$

$\diamond$

Dakle, za sve B-negativne vektore je Rayleighjev kvocijent takvih vektora manji ili jednak najvećoj B-negativnoj svojstvenoj vrijednosti, dok je za sve B-pozitivne vektore Rayleighjev kvocijent takvih vektora veći ili jednak najmanjoj B-pozitivnoj svojstvenoj vrijednosti. Ukoliko su A, B realne simetrične matrice analogne tvrdnje vrijede ako kompleksni prostor $\mathbb{C}^n$ (i njegove potprostore) zamijenimo s realnim potprostorom $\mathbb{R}^n$.
Veselić je u [83] dao sličnu minmax karakterizaciju u kojoj su potprostori S_i B-pozitivni, odnosno B-negativni, kako slijedi:

$$\lambda^\pm_k = \min_{S^\pm_k} \; \max_{\substack{x \in S^\pm_k \\ x \neq 0}} \frac{x^H Ax}{x^H Bx}, \qquad k = 1, \ldots, n_\pm,$$

gdje je $S_k^{\pm}$ bilo koji k-dimenzionalan B-pozitivan/B-negativan potprostor od $\mathbb{C}^n$. Za razliku od matričnog para (A, B) u kojem je B definitna, vanjske svojstvene vrijednosti $\lambda_{n_-}^-$, $\lambda_{n_+}^+$ nisu ekstremne vrijednosti Rayleighjevog kvocijenta. Jednostavan primjer za ilustraciju navedene tvrdnje preuzet je iz [83, str. 81.]:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Matrica A je pozitivno definitna pa je par (A, B) pozitivno definitan s definitnim intervalom $(-1, 2)$. Za $\phi \in \mathbb{R}$ uzmimo vektor $x = [\cosh\phi, \sinh\phi]^T$. Tada vrijedi $x^T Bx = 1$ i $\rho(x) = 3\cosh^2\phi - 1$, što nije omeđeno odozgo, tj.

$$\lambda_{n_+}^+ \neq \max_{x^T Bx > 0} \rho(x).$$

1.2.3 Svojstvo ispreplitanja svojstvenih vrijednosti

Definicija 1.19 Neka je (A, B) zadani hermitski matrični par. Za danu matricu $U \in \mathbb{C}^{n \times p}$, $p \leq n$ punog stupčanog ranga, par

$$(A_p, B_p) := (U^H AU, U^H BU)$$

zovemo *komprimirani par* para (A, B) *u odnosu na potprostor* $\mathcal{U} = \operatorname{span} U$ s matricom baze U. Iako komprimirani par ovisi o izabranoj bazi, njegov spektar ne ovisi o tom izboru.

Kovač-Striko i Veselić su u [41, Teorem 2.1] dokazali svojstvo ispreplitanja svojstvenih vrijednosti za realan pozitivno semidefinitan matrični par (A, J) gdje $J = \operatorname{diag}\{\pm 1\}$ i matrični par sastavljen od prvih glavnih podmatrica matrica A, J, tim redom. Liang, Li i Bai su u radu [49] dali slično svojstvo za hermitski pozitivno semidefinitan matrični par (A, B) u kojem B može biti neinvertibilna i pridruženi komprimirani par $(X^H AX, X^H BX)$ gdje je $X \in \mathbb{C}^{n \times k}$ takva da $X^H BX = \operatorname{diag}\{\pm 1\}$. Ta se svojstva mogu lako generalizirati na bilo koji hermitski pozitivno semidefinitan matrični par (A, B) i pridruženi mu komprimirani par $(U^H AU, U^H BU)$, gdje je $U \in \mathbb{C}^{n \times p}$ punog stupčanog ranga. Činjenica da je komprimirani par definitnog para nužno definitan, kao i da vrijede lijeve nejednakosti u (1.13), (1.14) je navedeno npr. u [44]. Iako sljedeći teorem vrijedi za pozitivno semidefinitne parove, zapisat ćemo ga u terminima pozitivno definitnog para.

Teorem 1.20 (Svojstvo ispreplitanja) Neka je (A, B) pozitivno definitan matrični par reda n sa konačnim svojstvenim vrijednostima poredanim kao u (1.8) i neka je $U \in \mathbb{C}^{n \times p}$ punog stupčanog ranga. Tada je komprimirani matrični par $(U^H AU, U^H BU)$ također pozitivno definitan; stoga su mu konačne svojstvene vrijednosti realne i mogu se poredati kako slijedi:

$$\theta_{p_-}^- \leq \cdots \leq \theta_1^- < \theta_1^+ \leq \cdots \leq \theta_{p_+}^+, \tag{1.12}$$

gdje $\mathsf{In}(U^H BU) = (p_+, p_-, p_0)$ te vrijedi $p_\pm \leq n_\pm$. Štoviše, vrijede sljedeća svojstva ispreplitanja svojstvenih vrijednosti:

$$\lambda_i^+ \leq \theta_i^+ \leq \lambda_{i+n-p}^+ \quad \text{za} \quad 1 \leq i \leq p_+, \tag{1.13}$$

$$\lambda_j^- \geq \theta_j^- \geq \lambda_{j+n-p}^- \quad \text{za} \quad 1 \leq j \leq p_-, \tag{1.14}$$

gdje formalno stavljamo $\lambda_i^+ = +\infty$ za $i > n_+$ i $\lambda_j^- = -\infty$ za $j > n_-$.

Dokaz. a) Ako je $A - \lambda_0 B$ pozitivno defininitna matrica, a U je punog stupčanog ranga, tada je za svaki $0 \neq x \in \mathbb{C}^n$ i $Ux \neq 0$ (linearna kombinacija stupaca) pa je $x^H(U^H(A-\lambda_0 B)U)x = (Ux)^H(A-\lambda_0 B)(Ux) > 0$ pa je stoga matrica $U^H(A-\lambda_0 B)U$ pozitivno definitna.

b) Da bismo dokazali $p_+ \leq n_+,\ p_- \leq n_-$ prvo upotpunimo U do baze u $\mathbb{C}^n$:

$$V = [\, U\, \overline{U}\,].$$

Tada, imamo

$$V^H(A - \lambda B)V = \begin{bmatrix} U^H(A-\lambda B)U & U^H(A-\lambda B)\overline{U} \\ \overline{U}^H(A-\lambda B)U & \overline{U}^H(A-\lambda B)\overline{U} \end{bmatrix}.$$

Za svaki λ za koji je $U^H(A - \lambda B)U$ invertibilna imamo

$$Z(\lambda)V^H(A-\lambda B)VZ(\lambda)^H = \operatorname{diag}\Big(U^H(A-\lambda B)U,\, W(\lambda)\Big)$$

gdje je

$$Z(\lambda) = \begin{bmatrix} I_p & 0 \\ -\overline{U}^H(A-\lambda B)U(U^H(A-\lambda B)U)^{-1} & I_{n-p} \end{bmatrix}$$

i Schurov komplement od $U^H(A - \lambda B)U$

$$W(\lambda) = \overline{U}^H(A-\lambda B)\overline{U} - \overline{U}^H(A-\lambda B)U(U^H(A-\lambda B)U)^{-1}U^H(A-\lambda B)\overline{U}.$$

Definiranjem

$$F := Z(\lambda)V^H$$

slijedi

$$F(A-\lambda B)F^H = \operatorname{diag}\Big(U^H(A-\lambda B)U,\, W(\lambda)\Big).$$

Sylvesterov teorem o inerciji daje,

$$\mathsf{In}_\pm(A-\lambda B) = \mathsf{In}_\pm(U^H(A-\lambda B)U) + \mathsf{In}_\pm(W(\lambda)),$$

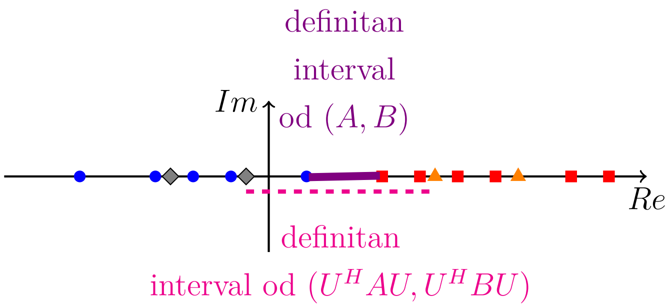
tj.

$$p_+ \leq n_+, \; p_- \leq n_-.$$

c) Ostatak dokaza također koristi Sylvesterov teorem i analogan je zadnjem dijelu dokaza Teorema 2.1 iz [41].

$\square$

Niže je skicirano svojstvo ispreplitanja svojstvenih vrijednosti: B-pozitivne svojstvene vrijednosti označene su s ■, dok su B-negativne svojstvene vrijednosti označene s •. $U^H BU$-pozitivne svojstvene vrijednosti označene s ▲, dok su $U^H BU$-negativne svojstvene vrijednosti označene s ◆.



Korolar 1.21 Neka je (A, B) pozitivno definitan matrični par reda n, te neka su A_p, B_p bilo koje $p \times p$ glavne podmatrice od A, B tim redom, uzete s istim indeksima za retke i stupce. Označimo s $\theta_k^{\pm}$ konačne svojstvene vrijednosti para (A_p, B_p) gdje

$$\theta_{p_-}^- \leq \cdots \leq \theta_1^- < \theta_1^+ \leq \cdots \leq \theta_{p_+},$$

i $\mathsf{In}(B_p) = (p_+, p_-, p_0)$ Tada

$$\begin{array}{ll} \lambda_i^+ \leq \theta_i^+ \leq \lambda_{i+n-p}, & i = 1, \ldots, p_+ \\ \lambda_j^- \geq \theta_j^- \geq \lambda_{j+n-p}, & j = 1, \ldots, p_- \end{array}.$$

Dokaz: Neka su $i_1, i_2, \ldots, i_p$ indeksi redaka i stupaca od A, B koji daju A_p, B_p, tim redom, i neka je $U = [e_{i_1}, e_{i_2}, \ldots, e_{i_p}] \in \mathbb{R}^{n\times p}$, gdje e_j označava j-ti stupac jedinične matrice reda n. Tada je $A_p = U^H AU$ i $B_p = U^H BU$. Primijenjujući Teorem 1.20 završavamo dokaz. $\square$

1.2.4 Princip minimizacije traga

Rezultat Teorema 1.20 koristi se u dokazu sljedećeg teorema Ky-Fanovog tipa, također poznatog kao *princip minimizacije traga*.

Teorem 1.22 ([41, 49] Princip minimizacije traga) Neka je (A, B) pozitivno definitan matrični par reda n sa svojstvenim vrijednostima poredanim kao u (1.8). Štoviše, neka

$$J_k = \begin{bmatrix} I_{k_+} & \\ & -I_{k_-} \end{bmatrix}, \quad k := k_+ + k_- \tag{1.15}$$

za neke nenegativne k_+, k_- takve da $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}(B)$, gdje se nejednakost podrazumijeva po elementima. Tada

$$\min_{\substack{X \in \mathbb{C}^{n\times k} \\ X^H B X = J_k}} \operatorname{tr}(X^H A X) = \sum_{i=1}^{k_+} \lambda_i^+ - \sum_{j=1}^{k_-} \lambda_j^- . \tag{1.16}$$

Štoviše, svaki minimizirajući $X_{\min}$ iz (1.16) ima svojstvo da njegovih prvih k_+ stupaca čine svojstveni vektori koji pripadaju $\lambda_1^+, \ldots, \lambda_{k_+}^+$, a njegovih zadnjih k_- stupaca čine svojstveni vektori koji pripadaju $\lambda_1^-, \ldots, \lambda_{k_-}^-$.

Napomena 1.23 Sameh i Wisniewski su 1982. u [70] dokazali princip mininizacije traga za definitne matrične parove (A, B) u kojima je B pozitivno definitna pa je (1.16) poopćenje tog principa na slučaj definitnog matričnog para (A, B) s indefinitnom B. Također, u [70] (v. i [69]) su dali algoritam baziran na principu minimizacije traga za računanje nekoliko najmanjih (ili najvećih) svojstevnih vrijednosti para (A, B) s pozitivno definitnom B. Sličan teorem minimizacije traga vrijedi za pozitivno semidefinitne matrične parove [49, Teorem 2.1]. ◇

U sljedećem korolaru, dan je sličan rezultat rezultatu iz (1.16), ali uz ograničenje na X: $\operatorname{span} X \subseteq \mathcal{U}$ za neki potprostor $\mathcal{U}$.

Korolar 1.24 Neka je (A, B) pozitivno definitan matrični par reda n, $\mathcal{U} \leq \mathbb{C}^n$ dani potprostor dimenzije $\dim \mathcal{U} = p \geq k := k_+ + k_-$ te U matrica baze za $\mathcal{U}$. Neka je

$$(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}(U^H B U) =: (p_+, p_-, p_0), \tag{1.17}$$

gdje se nejednakost podrazumijeva po elementima. Tada

$$\min_{\substack{X \in \mathbb{C}^{n\times k} \\ \operatorname{span} X \subseteq \mathcal{U} \\ X^H B X = J_k}} \operatorname{tr}(X^H A X) = \sum_{i=1}^{k_+} \theta_i^+ - \sum_{j=1}^{k_-} \theta_j^-$$

gdje je J_k kao u (1.15), i

$$\theta_{p_-}^- \leq \cdots \leq \theta_{k_-}^- \leq \cdots \leq \theta_1^- < \theta_1^+ \leq \cdots \leq \theta_{k_+}^+ \leq \cdots \leq \theta_{p_+}^+$$

su svojstvene vrijednosti komprimiranog matričnog para $(U^H AU, U^H BU)$.

Dokaz. Bilo koji X takav da $\operatorname{span} X \subseteq \mathcal{U}$ se može zapisati kao $X = UY$ gdje $Y \in \mathbb{C}^{p\times k}$ i stoga

$$\min_{\substack{X \in \mathbb{C}^{n\times k} \\ \operatorname{span} X \subseteq \mathcal{U} \\ X^H BX = J_k}} \operatorname{tr}(X^H AX) = \min_{\substack{Y \in \mathbb{C}^{p\times k} \\ Y^H(U^H BU)Y = J_k}} \operatorname{tr}(Y^H(U^H AU)Y) = \sum_{i=1}^{k_+} \theta_i^+ - \sum_{j=1}^{k_-} \theta_j^- .$$

Zadnja jednakost slijedi iz Teorema 1.22 primijenjenog na $(U^H AU, U^H BU)$. □

Sada primijenjujući svojstva ispreplitanja iz Teorema 1.20 slijedi

$$\min_{\substack{X \in \mathbb{C}^{n\times k} \\ X^H BX = J_k}} \operatorname{tr}(X^H AX) \leq \min_{\substack{Y \in \mathbb{C}^{p\times k} \\ Y^H(U^H BU)Y = J_k}} \operatorname{tr}\left(Y^H(U^H AU)Y\right), \tag{1.18}$$

s jednakosti ako i samo ako je $\operatorname{span} U$ razapet sa svojstvenim vektorima koji pripadaju λ_1^+, $\ldots$, $\lambda_{k_+}^+$ i λ_1^-, $\ldots$, $\lambda_{k_-}^-$.

Konačno, dajemo osnovni rezultat koji direktno slijedi iz Sylvesterovog teorema o inerciji i kojeg ćemo koristiti u našim algoritmima.

Lema 1.25 Neka je $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitska i promotrimo particioniranu matricu $U = [X, Y] \in \mathbb{C}^{n\times p}$ takvu da je $X^H BX$ invertibilna za neku $X \in \mathbb{C}^{n\times k}$. Nadalje, neka $\mathsf{In}(X^H BX) =: (k_+, k_-, 0)$ i $\mathsf{In}(U^H BU) =: (p_+, p_-, p_0)$. Tada

$$k_+ \leq p_+, \qquad k_- \leq p_-.$$

Dokaz. Za

$$U^H BU = \begin{bmatrix} X^H BX & X^H BY \\ Y^H BX & Y^H BY \end{bmatrix}$$

definiramo

$$Z := \begin{bmatrix} I_k & -(X^H BX)^{-1} X^H BY \\ 0 & I_{n-k} \end{bmatrix}.$$

Tada

$$Z^H U^H BUZ = \operatorname{diag}(X^H BX, \hat{B}_{22})$$

gdje je $\hat{B}_{22} = Y^H BY - Y^H BX(X^H BX)^{-1} X^H BY$ Schurov komplement. Sylvesterov teorem o inerciji povlači

$$\begin{aligned} p_+ &= \mathsf{In}_+(U^H BU) \geq \mathsf{In}_+(X^H BX) = k_+, \\ p_- &= \mathsf{In}_-(U^H BU) \geq \mathsf{In}_-(X^H BX) = k_-. \end{aligned}$$ □

Napomena: Ovu lemu možemo direktno dokazati koristeći [63, Teorem 7] s pravokutnom matricom $S := [I_k, 0_{p-k}]^T$, te $H := U^H BU$ i $K := X^H BX$.

Lemu 1.25 tumačimo na sljedeći način: ako u potprostoru $\operatorname{span} U$ imamo k_+ (k_-) B-pozitivnih (B-negativnih) vektora, onda se proširivanjem potprostora s novim vektorima ukupan broj B-pozitivnih (B-negativnih) vektora može samo povećati.

1.2.5 Neki nužni i dovoljni uvjeti za definitnost. Rayleigh-Ritzova procedura

Za danu hermitsku matricu B neka je $n_+ := \mathsf{In}_+(B)$ i $n_- := \mathsf{In}_-(B)$.

Teorem 1.26 [41],[49, Teorem 2.2] Neka je (A, B) hermitski matrični par reda n, i pretpostavimo da je regularan. Također pretpostavimo da je $n_+ \geq 1$ i $n_- \geq 1$.

1. Nužan i dovoljan uvjet da bi (A, B) bio pozitivno definitan je da su oba infimuma

$$t_0^+ = \inf_{x^H Bx = 1} x^H Ax, \quad t_0^- = \inf_{x^H Bx = -1} x^H Ax \tag{1.19}$$

   dostižna i da vrijedi $t_0^+ + t_0^- > 0$. U tom slučaju je $\langle -t_0^-, t_0^+ \rangle$ definitni interval para (A, B).

2. Pretpostavimo da $1 \leq k_+ \leq n_+$ i $1 \leq k_- \leq n_-$ i da definitni intervali pozitivno definitnih parova $(X^H AX, J_k)$, uzetih po svim $X \in \mathbb{C}^{n\times k}$ takvima da $X^H BX = J_k$, gdje je J_k kao u (1.15), imaju neprazan presjek $\mathcal{I}$. Tada je (A, B) pozitivno definitan par i $\mathcal{I}$ je njegov definitan interval.

Lema 1.27 Neka je (A, B) hermitski matrični par reda n i pretpostavimo da je regularan. Neka je nadalje $U \in \mathbb{C}^{n\times p}$ matrica punog ranga. Par (A, B) je definitan par akko je par $(U^H AU, U^H BU)$ definitan par za sve matrice U punog ranga i za sve $p = 1, \ldots, n$.

Lema 1.28 Neka je (A, B) hermitski matrični par reda n i pretpostavimo da je regularan. Također pretpostavimo da je $n_+ \geq 1$ i $n_- \geq 1$. Neka je $U \in \mathbb{C}^{n\times p}$ matrica punog ranga takva da je $\mathsf{In}(U^H BU) \geq (1, 1, 0)$, gdje se nejednakost podrazumijeva po elementima. Par (A, B) je pozitivno (negativno) definitan par akko je par $(U^H AU, U^H BU)$ pozitivno (negativno) definitan par za sve matrice U punog ranga i za sve $p = 1, \ldots, n$.

Rayleigh-Ritzova procedura je standardna metoda računanja aproksimacija iz danog potprostora svojstvenih parova hermitske matrice ili hermitskog matričnog para. Parlett

Algoritam 1.1 Rayleigh-Ritzova procedura

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: koeficijenti hermitskog matričnog para (A, B), potprostor $\mathcal{U}$ dimenzije p.
Izlaz: Aproksimacije (θ_i, x_i) svojstvenih parova para (A, B).
1: Odrediti matricu baze U za $\mathcal{U}$.
2: Izračunati $A_p = U^H AU$ i $B_p = U^H BU$.
3: Izračunati svojstvene parove (θ_i, y_j) para (A_p, B_p), $i = 1, \ldots, p$.
4: Izračunati $x_i = Uy_i$, $i = 1, \ldots, p$.

je u [64] opravdao korištenje te procedure na tri načina. Osnovna procedura je opisana u Algoritmu 1.1.

Ukoliko je (θ, y) svojstveni par komprimiranog para (A_p, B_p), tj. $A_p y = \theta B_p y$, $y \neq 0$, onda (θ, x), gdje je $x = Uy$ zovemo *Ritzov par para* (A, B) *u odnosu na potprostor* $\mathcal{U} = \operatorname{span} U$, tj. θ je *Ritzova vrijednost*, a x je *Ritzov vektor para* (A, B) *u odnosu na potprostor* $\mathcal{U}$.

Jedan od vrlo značajnih potprostora na koji se primijenjuje Rayleigh-Ritzova procedura jest neki Krylovljev potprostor, npr.

$$K_p(q; A, B) := \operatorname{span}\{\, q, B^{-1}Aq, \ldots, (B^{-1}A)^{p-1}q \,\}\, , \; p \in \mathbb{N}$$

za invertibilnu B i dani vektor $q \neq 0$. Iterativna primjena vodi do Lanczosovog algoritma koji je za definitan matrični par (A, B) s indefinitnom B dan u [45, 44].

Na kraju, definiramo rezidual vektora i navodimo pripadno svojstvo ortogonalnosti.

Definicija 1.29 Neka je (A, B) hermitski par reda n i $x \in \mathbb{C}^n$ proizvoljan vektor. *Rezidual vektora* x *u odnosu na par* (A, B) je vektor $r(x; A, B) := Ax - \rho(x)Bx$. Koristit ćemo kraću oznaku $r(x)$ ukoliko je jasno na koji se par (A, B) misli.

Vrijedi sljedeće svojstvo (obične) ortogonalnosti:

$$r(x) \perp x.$$

Posebno, ako je $(\theta, x) = (\theta, Uy)$ Ritzov par para (A, B) u odnosu na potprostor $\mathcal{U} = \operatorname{span} U$ dimenzije p, onda je $r(x) = Ax - \theta Bx$, tj. Ritzova vrijednost je jednaka Rayleighovom kvocijentu pripadnog Ritzovog vektora. Naime, s jedne strane je $U^H AUy = \theta U^H BUy$ pa je

$$\theta = \frac{y^H U^H AUy}{y^H U^H BUy},$$

dok je s druge strane

$$\rho(x) = \frac{(Uy)^H A(Uy)}{(Uy)^H B(Uy)}$$

pa je $\theta = \rho(x)$. Stoga, vrijedi $(A - \theta B)x \perp x$, ali i puno više (obična ortogonalnost):

$$(A - \theta B)x \perp \mathcal{U}.$$

Naime, po definiciji Ritzovog para vrijedi

$$U^H AUy - \theta U^H BUy = 0,$$

a kako proizvoljan $u \in \mathcal{U}$ možemo zapisati kao $u = Uz$, $z \in \mathbb{C}^p$ slijedi

$$u^H(A - \theta B)x = z^H(U^H AUy - \theta U^H BUy) = 0.$$

Dakle, Ritzov vektor je onaj vektor iz potprostora $\mathcal{U}$ za koji je pripadni rezidual ortogonalan na $\mathcal{U}$.

1.2.6 Neki izvori definitnih matričnih parova

Linearizacija kvadratnog svojstvenog problema

Kvadratni svojstveni problem (KSP) sastoji se u nalaženju skalara $\lambda \in \mathbb{C}$ i nenul vektora $x \in \mathbb{C}^n$ takvih da vrijedi

$$Q(\lambda)x := (\lambda^2 M + \lambda C + K)x = 0, \tag{1.20}$$

gdje su M, C, $K \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitske matrice. Skalari λ zovu se *svojstvene vrijednosti KSP-a*, a pridruženi vektori x zovu se *svojstveni vektori KSP-a*. Od posebne važnosti su hiperbolni KSP-i.

Definicija 1.30 KSP je hiperbolan ako je M pozitivno definitna i za svaki $0 \neq x \in \mathbb{C}^n$ vrijedi

$$(x^H Cx)^2 \geq 4(x^H Mx)(x^H Kx).$$

Hiperbolni KSP-i imaju $2n$ realnih svojstvenih vrijednosti koje su podijeljene u dva disjunktna skupa, od kojih svaki sadrži točno n svojstvenih vrijednosti (brojeći algebarske višekratnosti).

Uobičajeno se KSP reda n rješava svođenjem na GSP reda $2n$ postupkom linearizacije (iako su razvijene metode koje direktno rade s matricama M, C, K, kao npr. Matlab-ova funkcija $\mathsf{polyeig}(\mathsf{K}, \mathsf{C}, \mathsf{M})$). Tako dobiveni GSP ima iste svojstvene vrijednosti kao i dani KSP, a svojstveni vektori su jednostavno povezani. Navest ćemo dva uobičajena tipa linearizacije uz pretpostavku da je M pozitivno definitna.

i) Jedna moguća linearizacija KSP-a (1.20) vodi do hermitskog para (A, B) reda $2n$, danog s

$$A = \begin{bmatrix} M & \\ & -K \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} & M \\ M & C \end{bmatrix}. \tag{1.21}$$

Pozitivna definitnost tog matričnog para ekvivalentna je hiperbolnosti početnog KSP-a [33, 82]. Kada je C pozitivno definitna, B-pozitivni i B-negativni svojstveni vektori su sadržani u potprostorima razapetima sa stupcima od $\begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix}$ i $\begin{bmatrix} M^{-1}C \\ -I \end{bmatrix}$, tim redom. To pojednostavljuje zadatak izabiranja prikladnih početnih vektora u našim algoritmima predstavljenima u Poglavlju 2 i Poglavlju 3.

ii) Dodatno pretpostavimo da je i K pozitivno definitna, te neka su dane neke dekompozicije matrica K i M :

$$K = L_1 L_1^H, \quad M = L_2 L_2^H. \tag{1.22}$$

Još je jedna linearizacija KSP-a (1.20) značajna (v. npr. [83]), a to je ona pomoću matričnog para (A', J') gdje je

$$A' = \begin{bmatrix} 0 & L_1^H L_2^{-H} \\ L_2^{-1} L_1 & L_2^{-1} C L_2^{-H} \end{bmatrix}, \quad J' = \begin{bmatrix} I_n & \\ & -I_n \end{bmatrix} \tag{1.23}$$

($J'A'$ je tzv. "phase-space" matrica [83]). Pozitivna definitnost tog matričnog para ekvivalentna je hiperbolnosti početnog KSP [82, Teorem A5]. Postoje mnoge dekompozicije oblika (1.22), od kojih ćemo istaknuti dvije. Prva, numerički najisplativija, je Cholesky dekompozicija matrica K, M. Druga je sljedeća: $L_1 = \Phi^{-H}\Omega$, $L_2 = \Phi^{-H}$, gdje su invertibilna Φ i realna pozitivno definitna dijagonalna Ω dane s:

$$\Phi^H K \Phi = \Omega^2, \quad \Phi^H M \Phi = I_n,$$

tj. invertibilna matrica Φ istovremeno dijagonalizira matrični par (K, M), a dijagonalna matrica Ω^2 sadrži svojstvene vrijednosti para (K, M). Kako su obje matrice K, M pozitivno definitne, to je i Ω^2, pa je Ω pozitivno definitni korijen matrice Ω^2, tj. $\Omega = \operatorname{diag}(\omega_1, \ldots, \omega_n)$ je dijagonalna matrica s pozitivnim elementima koji se nazivaju *svojstvene frekvencije KSP-a* (1.20) uz $C = 0$. Kako je $L_2^{-1} L_1 = \Omega$ dobivamo tzv. modalnu reprezentaciju:

$$A' = \begin{bmatrix} 0 & \Omega \\ \Omega & D \end{bmatrix}, \quad J' = \begin{bmatrix} I_n & \\ & -I_n \end{bmatrix}, \tag{1.24}$$

gdje je $D = \Phi^H C \Phi$. Ukoliko je $D = \operatorname{diag}(d_{11}, \ldots, d_{nn})$ dijagonalna matrica, tj. ukoliko matrica Φ istovremeno dijagonalizira sve tri matrice M, C, K (tzv. modalno prigušenje), onda je moguće matrični par (A', J') iz (1.24) jednostavno svesti na tridijagonalni par transformacijom kongruencije pomoću savršene permutacije matricom P dane s $Pe_{2j-1} = e_j$, $Pe_{2j} = e_{j+n}$, $j = 1, \ldots, n$, gdje je e_j $j-$ti stupac jedinične matrice I_{2n} (eng. the perfect shuffling). Dobivamo $A'' = P^T AP, J'' = P^T JP$, gdje je

$$A'' = \operatorname{diag}(A''_1, \ldots, A''_n), \quad A''_i = \begin{bmatrix} 0 & \omega_i \\ \omega_i & d_{ii} \end{bmatrix}, \tag{1.25a}$$

$$J'' = \operatorname{diag}(j, \ldots, j), \quad j = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{1.25b}$$

Produktni svojstveni problem

Za dane hermitske pozitivno definitne matrice $K, M \in \mathbb{C}^{m\times m}$ produktni svojstveni problem sastoji se u traženju svojstvenih vrijednosti matričnog produkta KM (ili ekvivalentno MK). Produktni svojstveni problem pojavljuje se u računalnoj kvantnoj kemiji i fizici u kojoj se traži nekoliko najmanjih pozitivnih svojstvenih vrijednosti matričnog produkta KM. Taj je problem ekvivalentan traženju svojstvenih vrijednosti najbližih nuli matričnog para (A, B) gdje

$$A = \begin{bmatrix} K & 0 \\ 0 & M \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix}. \tag{1.26}$$

Par (A, B) je očito pozitivno definitan s definitnim pomakom $\lambda_0 = 0$.

Teorem 1.31 [4, Odjeljak 2] Neka su $K, M \in \mathbb{C}^{m\times m}$ hermitske pozitivno definitne matrice i (A, B) kao u (1.26). Tada vrijedi:

1. Postoji invertibilna $Y \in \mathbb{C}^{m\times m}$ takva da

   $$K = Y\Lambda^2 Y^H, \quad M = XX^H,$$

   gdje $\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_m) \succ 0$ i $X = Y^{-H}$.

2. λ^2 je svojstvena vrijednost od KM ako i samo ako su $\pm\lambda$ svojstvene vrijednosti para (A, B).

3. Par (A, B) je dijagonalizibilan s

   $$A \begin{bmatrix} X & X \\ Y\Lambda & -Y\Lambda \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} X & X \\ Y\Lambda & -Y\Lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda & 0 \\ 0 & -\Lambda \end{bmatrix}.$$

Dokaz. Kako $KM = K^{1/2}K^{1/2}M$ ima iste svojstvene vrijednosti kao i $K^{1/2}MK^{1/2}$ koja je hermitski pozitivno definitna matrica, slijedi da KM ima pozitivne realne svojstvene vrijednosti i može se dijagonalizirati invertibilnom matricom Y. Nadalje $KM = Y\Lambda^2 Y^{-1} = Y\Lambda^2 Y^H Y^{-H} Y^{-1}$ pa možemo pisati $K = Y\Lambda^2 Y^H$, $M = Y^{-H}Y^{-1}$, tj. $M = XX^H$ uz $X := Y^{-H}$. Generalizirani svojstveni problem s matricama A, B ekvivalentan je običnom svojstvenom problemu s matricom $H := B^{-1}A = BA$ gdje

$$H = \begin{bmatrix} 0 & M \\ K & 0 \end{bmatrix}.$$

Tada promatrajući svojstveni problem matrice

$$H^2 = \begin{bmatrix} MK & 0 \\ 0 & KM \end{bmatrix}$$

slijedi druga tvrdnja. Zadnja tvrdnja slijedi direktnim raspisivanjem korištenjem prve tvrdnje.

□

Dakle, svojstvene vrijednosti matričnog para nastalog iz produktnog svojstvenog problema možemo poredati kako slijedi:

$$-\lambda_m \leq \cdots \leq -\lambda_1 < 0 < \lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_m.$$

Bai i Li su u radovima [4, 5, 6], predložili algoritam tipa LOBPCG, kojeg su nazvali LOBP4DCG, za računanje najmanjih svojstvenih vrijednosti matričnog produkta KM, gdje su K, M hermitske pozitivno semidefinitne matrice i jedna od njih je definitna. U tim radovima rade direktno s matricama K, M bez prelaska na par (A, B). Ti radovi su inspirirali rad Kressnera, Miloloža Pandur i Shao [42] u kojem je napravljena generalizacija njihovog algoritma (v. Potpoglavlje 3.3).

Matrica linearnog sustava u formi sedlaste točke

Sljedeći tekst preuzet je iz [29, Odjeljak 4.2]. Neka je $A = A^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ pozitivno definitna, $B \in \mathbb{R}^{m\times n}$ s $m \leq n$ i $C = C^T \in \mathbb{R}^{m\times m}$ pozitivno semidefinitna. Matrica linearnog sustava u formi sedlaste točke tada ima blok strukturu

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{bmatrix}. \tag{1.27}$$

Matrica $\mathcal{A}$ je uobičajeno velika i rijetka, i indefinitna je s n pozitivnih i $\text{rang}(C+BA^{-1}B^T)$ (što je obično blizu m) negativnih svojstvenih vrijednosti. U praksi često indefinitnost matrice $\mathcal{A}$ usporava iterativne metode za rješavanje linearnih sustava (npr. Krylovljeve potprostorne metode). Liesen i Parlett su 2008. u radu [50] pokazali da ukoliko je poznat realan broj μ takav da je $\mathcal{M}(\mu) = \mathcal{A} - \mu\mathcal{J}$, s $\mathcal{J} = \operatorname{diag}(I_n, -I_m)$, pozitivno definitna, tada se može napraviti iteracija konjugiranih gradijenata za rješavanje linearnog sustava $\mathcal{J}\mathcal{A}x = \mathcal{J}b$. Dokazali su [50, Teorem 2.2] da je $\mathcal{M}(\mu)$ pozitivno definitna ako i samo ako

$$\lambda_{\min}(A) > \mu > \lambda_{\max}(C) \quad \text{i} \quad \|(\mu I_m - C)^{-1/2} B (A - \mu I_n)^{-1/2}\|_2 < 1. \tag{1.28}$$

Nalaženje μ koji zadovoljava oba uvjeta može biti teško kada su matrice velike. Liesen i Parlett su također pokazali da ako je $\lambda_{\min}(A) > \mu > \lambda_{\max}(C)$ tada $\mathcal{M}(\widetilde{\mu})$ s $\widetilde{\mu} = (\lambda_{\min}(A) + \lambda_{\max}(C))/2$ je pozitivno definitna ako

$$2\|B\|_2 < \lambda_{\min}(A) - \lambda_{\max}(C), \tag{1.29}$$

što je dovoljan uvjet koji se lakše provjerava, ali je često previše ograničavajući, kao što je ilustrirano numeričkim primjerima u [50].
Provjera je li $\mathcal{M}(\mu) = \mathcal{A} - \mu\mathcal{J}$ pozitivno definitna za neki $\mu \in \mathbb{R}$, svodi se na provjeru je li par $(\mathcal{A}, \mathcal{J})$ pozitivno definitan par, pa se korištenjem nekog algoritma za ispitivanje definitnosti para može izbjeći rad s (1.28) ili (1.29).

Poglavlje 2

Ispitivanje definitnosti hermitskog matričnog para

U ovom poglavlju predlažemo novi algoritam ispitivanja definitnosti danog hermitskog matričnog para. Algoritam je posebno pogodan za velike rijetko popunjene i vrpčaste matrične parove. Algoritam se temelji na iterativnom ispitivanju malih gusto popunjenih komprimiranih parova koji nastaju korištenjem test-potprostora malih dimenzija. Spomenuti algoritam smo nazvali *Algoritam ispitivanja potprostora*, a nastao je kao generalizacija metode koordinatne relaksacije koju je Keller 1994. opisala u svojoj disertaciji [36, Odjeljak 3.6.2]. Također, predlažemo moguće ubrzanje algoritma.
U Potpoglavlju 2.1 dajemo pregled postojećih algoritama ispitivanja definitnosti danog hermitskog matričnog para. Zatim u Odjeljku 2.2.1 predlažemo jednostavne algoritme ispitivanja definitnosti korištenjem podmatrica. Nažalost, ti algoritmi ne moraju dati konačan odgovor: je li dani matrični par definitan ili nije. U algoritmu ispitivanja potprostora, koji je opisan u Odjeljku 2.2.2, test-potprostori se iteriraju tako da osiguravaju određenu monotonost koja garantira završenje ispitivanja u konačno mnogo koraka. U Potpoglavlju 2.3 dani su numerički eksperimenti u kojima uspoređujemo naše algoritme s jednim postojećim algoritmom.

Cilj ovog poglavlja jest ispitati je li dani hermitski matrični par (A, B) definitan ili nije:

svojstvo	odgovor
definitan	da/ne/blizu indefinitnog.

Odgovor *blizu indefinitnog* znači da je interval unutar kojeg tražimo definitan pomak (ukoliko takav postoji) jako male duljine, odnosno manji od neke zadane tolerancije. U tom slučaju male perturbacije matričnih elemenata mogu narušiti njegovu definitnost. Ukoliko je par (A, B) definitan s indefinitnom matricom B, još nas zanima je li par (A, B) pozitivno ili negativno definitan:

svojstvo	odgovor
pozitivno definitan	da/ne/blizu pozitivno semidefinitnog;
negativno definitan	da/ne/blizu negativno semidefinitnog.

Ako je par (A, B) pozitivno definitan i B je indefinitna, onda taj par nije negativno definitan; i obratno. Ako je par (A, B) pozitivno definitan ili negativno definitan, onda je on nužno definitan.

2.1 Pregled postojećih algoritama

U ovom potpoglavlju dajemo pregled postojećih algoritama ispitivanja definitnosti danog hermitskog matričnog para.

1. Lučni algoritam i njegova poboljšana verzija
   Iterativan algoritam koji za dani hermitski matrični par (A, B) nalazi realan broj ϕ takav da je matrica $A\cos\phi + B\sin\phi$ pozitivno definitna ili zaključuje da takav broj ne postoji je predložen 1979. u doktorskoj disertaciji Moona [54]. Kasnije su taj tzv. lučni algoritam doradili Crawford i Moon u radovima [19, 17], ali u njima postoji nejasnoća u izjavama i izvođenju samoga algoritma. No, 2009. su Guo, Higham i Tisseur u radu [29] uklonili te nedostake, te dali poboljšanu verziju.
   Za dani hermitski matrični par (A, B) u kojem nisu obje matrice nul-matrica, promatra se funkcija

$$f(x) := \frac{x^H(A+iB)x}{|x^H(A+iB)x|}, \quad x \in \mathbb{C}^n,\ x^H(A+iB)x \neq 0. \tag{2.1}$$

   Stoga $f(x)$ leži na jediničnoj kružnici. Slika funkcije f je opisana sljedećom lemom:

   Lema 2.1 (Au-Yeung [86, 87]) Slika funkcije f iz (2.1) može biti samo jedno od sljedećeg:

   i) zatvoren luk na jediničnoj kružnici duljine manje od π,
   ii) dvije dijametralno suprotne točke na jediničnoj kružnici,
   iii) cijela jedinična kružnica,
   iv) pola kružnice s ili bez rubnih točaka.

   Ako je par (A, B) definitan, onda je i) jedina mogućnost, a ako je par (A, B) indefinitan može se dogoditi bilo koja mogućnost i)-iv).

   Za bilo koja dva kompleksna broja a i b na jediničnoj kružnici takva da $a \neq -b$, tj. a i b nisu dijametralno suprotne točke, s luk$[a, b]$ označimo kraći luk na jediničnoj kružnici koji povezuje a i b. Duljinu u radijanima luka luk$[a, b]$ označimo s $\theta[a, b]$. Ukoliko je $a = -b$, definiramo $\theta[a, b] := \pi$ i za luk$[a, b]$ se može uzeti bilo koji od dva luka koji povezuje a i b. Za definitan matrični par sliku funkcije f iz (2.1) označimo s luk$[\tilde{a}, \tilde{b}]$, gdje je $\theta[\tilde{a}, \tilde{b}] < \pi$ prema Lemi 2.1. Vrijedi sljedeća tvrdnja.

Lema 2.2 [29, Lema 2.2] Neka je $c := \cos\phi + i\sin\phi$, $\phi \in \mathbb{R}$. Pretpostavimo da matrica $A_\phi := A\cos\phi + B\sin\phi$ nije pozitivno definitna i neka je $x \neq 0$ takav da $x^H A_\phi x \leq 0$. Ako $x^H(A+iB)x \neq 0$ tada za $d := f(x)$ vrijedi $\theta[c,d] \geq \pi/2$.

Slijedi opis lučnog algoritma. Neka je (A,B) zadani hermitski matrični par. Računamo vrijednost funkcije f iz (2.1) na proizvoljnom početnom vektoru $x_0 \neq 0$. Kako je $f(x_0)$ na jediničnoj kružnici to postoji $\phi \in \mathbb{R}$ takav da je $f(x_0) = \cos\phi + i\sin\phi$ i definirajmo $c := \cos\phi + i\sin\phi$. Ako je matrica $A_\phi := A\cos\phi + B\sin\phi$ za dani ϕ pozitivno definitna, tada je zadani matrični par (A,B) definitan i algoritam staje. Ukoliko matrica A_ϕ nije pozitivno definitna, odabire se vektor $x \neq 0$ takav da $x^H A_\phi x \leq 0$. Ukoliko je $x^H(A+iB)x = 0$ tada je Crawfordov broj (v. Definiciju 1.1) jednak nuli pa je zadani matrični par indefinitan, te algoritam staje. U suprotnom, tj. ako su ispunjena oba uvjeta Leme 2.2, računamo $f(x)$ i dobivamo novu točku $d := f(x)$ na jediničnoj kružnici za koju je $\theta[c,d] \geq \pi/2$ po Lemi 2.2. Tada definiramo $a := c$ i $b := d$. Prema Lemi 2.1, ako je $b = -a$ tada je zadani par (A,B) indefinitan, u suprotnom luk$[a,b]$ mora biti dio slike od f, opet prema Lemi 2.1. Tada za novi $c := \cos\phi + i\sin\phi$, koji je jednak sredini luka luk$[a,b]$ provjeravamo uvjete Leme 2.2. Ako se ne ustanovi (in)definitnost, računa se novi d koji je izvan luka luk$[a,b]$ i luk se proširuje (unutar slike od f) zamjenjujući bliži rub s d. Ako je duljina novog luka veća od π, par je prema Lemi 2.1 indefinitan. U suprotnom, ponovimo opisani proces na tom novom luku.
Ukoliko opisani algoritam ne stane nakon konačno mnogo koraka, Guo, Higham i Tisseur su dokazali da niz lukova luk$[a_k, b_k]$, gdje su a_k, b_k generirani nakon k-tog testa pozitivne definitnosti matrice A_ϕ u opisanom algoritmu, uvijek konvergira prema nekom luku bio par definitan ili ne jer nakon k-tog izvršenog koraka lučnog algoritma vrijedi [29, Lema 2.4]

$$\theta[a_k, b_k] \geq \pi(1 - 2^{-k}).$$

Ako je slika funkcije f za dani par duljine π ili približno jednaka π, algoritam može pogrešno odrediti definitnost u aritmetici konačne preciznosti, no pokazali su da je algoritam numerički stabilan u smislu da točno određuje definitnost za perturbirani par $(A + \Delta A, B + \Delta B)$ gdje

$$\| [\Delta A \, \Delta B] \|_2 \leq c_n \epsilon \| [\, A \, B \,] \|_2,$$

gdje je c_n skromna konstanta, ϵ jedinična greška zaokruživanja. Također, dali su gornju ogradu za Crawfordov broj definitnog para (A,B):

$$\gamma(A,B) \leq 2^{-1/2} \| [\, A \, B \,] \|_2 (\pi - \theta[\tilde{a}, \tilde{b}])$$

pa je relativna udaljenost para (A, B) do najbližeg indefinitnog para (v. (1.4), (1.5)) omeđena s $2^{-1/2}(\pi - \theta[\tilde{a}, \tilde{b}])$. Zaključuju da lučni algoritam može netočno odrediti indefinitnost samo ako je (A, B) blizu, relativno po normi, indefinitnog para. Zatim raspravljaju o implementacijskim detaljima: kako provjeravati pozitivnu definitnost matrice A_ϕ (različiti načini provođenja faktorizacije Choleskog; preporučuju faktorizaciju Choleskog s potpunim pivotiranjem ako matrica nije rijetko popunjena, te faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja za rijetko popunjene matrice; dok za velike i rijetko popunjene matrice preporučuju Matlab-ovu funkciju `chol`) i kako računati smjer vektora $x \neq 0$ za koji vrijedi $x^H A_\phi x \leq 0$ (eng. nonpositive curvature). U slučaju netočno izračunatog takvog smjera x, tzv. nepozitivne zakrivljenosti može se dogoditi da se luk ne proširi ili da se čak suzi, što je vjerojatno u slučaju kada je $\theta[\tilde{a}, \tilde{b}]$ blizu π. U tom slučaju algoritam možemo ponovno pokrenuti s novim lukom. No, po njihovim eksperimentima to se rijetko događa, a ukoliko se dogodi algoritam se oporavlja ukoliko mu se dopusti da nastavi.

Numerički trošak lučnog algoritma u svakoj iteraciji je računanje brojeva $x^H Ax$ i $x^H Bx$, pokušaj provođenja faktorizacije Choleskog do kraja, te odabiranje smjera $x \neq 0$ takvog da $x^H A_\phi x \leq 0$, za A_ϕ iz Leme 2.2. Potpuna faktorizacija Choleskog zahtjeva $n^3/3$ računskih operacija, gdje je n red matrica A, B, a ukoliko matrica A_ϕ nije pozitivno definitna, pokušaj faktorizacije Choleskog može se prekinuti puno prije izvršenja n koraka. Ovaj algoritam je pogodan kako za matrične parove malih dimenzija, tako i za one velikih dimenzija.

2. Indefinitni J-Jacobijev algoritam

   Veselić je 1993. u radu [82] predstavio algoritam Jacobijevog tipa za realne simetrične definitne matrične parove (A, J) malih do srednjih dimenzija, u kojima je $J^2 = I$, $J = \mathrm{diag}(I_m, -I_{n-m})$ dijagonalna matrica predznaka. Algoritam rješava cijeli generalizirani svojstveni problem (ukoliko nije potrebno, svojstveni vektori se ne računaju) para (A, J) radeći samo na jednoj matrici koju dijagonalizira iterativno koristeći J-ortogonalne elementarne kongruencije (trigonometrijske i hiperbolne rotacije C):

$$A' = C^T AC, \quad J = C^T JC.$$

   Simetrija je tijekom procesa očuvana, a za rotacijske parametre potrebni su samo pivotni elementi trenutne radne matrice, što ubrzava paralelizaciju algoritma. Algoritam konvergira globalno [82] i asimptotski kvadratično [23, 51], te je točan u relativnom smislu [74, 76]. Ukoliko se ne pretpostavi definitnost para na samom početku, indefinitni J-Jacobijev algoritam može se koristiti kao algoritam za ispitivanje definitnosti para; u tom slučaju nije potrebno računati svojstvene vektore. Na samom početku se ispitivanjem dijagonalnih elemenata radne matrice utvrđuje je li par indefinitan ili je možda pozitivno (negativno) definitan. Redukcija se provodi

dok se ne prekrše nužni uvjeti (provođenje hiperbolne rotacije kada je njezin red, uvjet konstantnog predznaka kod izvršavanja svake hiperbolne rotacije, kriterij dijagonalnih elemenata) dani u [82, Poglavlje 2] (u tom slučaju par je indefinitan) ili dok algoritam ne dijagonalizira radnu matricu (u tom slučaju par je definitan).
Iako se čini da ovaj algoritam mora proći do kraja da bi potvrdio definitnost para, to nije istina. Naime, unutar procesa dijagonalizacije, a u svrhu bržeg ispitivanja definitnosti, može se iskoristiti Geršgorinov teorem.

Teorem 2.3 (Geršgorin) Neka je A kvadratna matrica reda n i neka je

$$R'_i(A) := \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}|, \quad 1 \leq i \leq n.$$

$R'_i(A)$ je suma apsolutnih vrijednosti elemenata u i-tom retku, bez dijagonalnog. Sve svojstvene vrijednosti matrice A nalaze se u uniji od n diskova

$$G(A) := \bigcup_{i=1}^{n} \{\, z \in \mathbb{C} : \mid z - a_{ii}| \leq R'_i(A) \,\}\,.$$

Nadalje, ako unija k tih diskova tvori povezano područje koje nema presjeka s ostalih $n-k$ diskova, tada se točno k svojstvenih vrijednosti nalazi unutar tog područja.$\diamond$

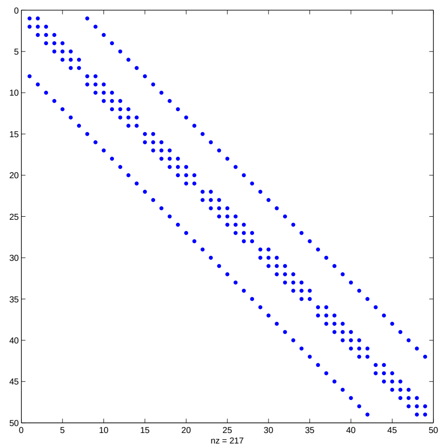
Neka je A' trenutna radna matrica. Pretpostavimo da je na samom početku J-Jacobijevog algoritma, ispitivanjem dijagonalnih elemenata u matrici A ustanovljeno da par (A, J) nije negativno definitan, dakle ostaje mogućnost da je pozitivno definitan. Nakon izvršenog jednog ciklusa J-Jacobijevog algoritma, izračunamo brojeve $R'_i(A')$ iz Geršgorinovog teorema. Tada računamo najveći mogući pomak u lijevo dijagonalnih elemenata gornjeg bloka radne matrice A', tj. matrice $A'(1:m, 1:m)$:

$$g_1 := \min \{\, a'_{ii} - R'_i(A') : \ i = 1\ldots, m \,\}$$

i računamo najveći mogući pomak u desno dijagonalnih elemenata donjeg bloka radne matrice A', tj. matrice $A'(m+1:n, m+1:n)$:

$$g_2 := \max \{\, -a'_{ii} + R'_i(A') : \ i = m+1\ldots, n \,\}\,.$$

Ukoliko je $g_2 < g_1$ znači da je početni par (A, J) zaista pozitivno definitan i ako smo samo to htjeli saznati, ne moramo dalje nastavljati s dijagonalizacijom. Ako ta nejednakost ne vrijedi onda nastavljamo s novim ciklusom, i nakon završenog ciklusa opet provjeravamo odnos brojeva g_1 i g_2. Ako je nakon ustanovljenja pozitivne definitnosti ipak poželjno dobiti i svojstvene vektore oni se mogu rekonstruirati, tako da se u prethodnom procesu dijagonalizacije zapamte mjesta i parametri rotacija.



Slika 2.1: Uzorak popunjenosti matrice A koja se pojavljuje u diskretizaciji Poissonove jednadžbe s 5-točkovnim operatorom na 7×7 mreži.

Eksperiment 2.4 Neka je A pozitivno definitna matrica reda 49 koja se pojavljuje u diskretizaciji Poissonove jednadžbe s 5-točkovnim operatorom na 7×7 mreži. Na Slici 2.1 možemo vidjeti uzorak popunjenosti matrice A. Matrica A na glavnoj dijagonali ima sve vrijednosti jednake 4, na sedmim sporednim dijagonalama ima vrijednosti -1, na prvim sporednim dijagonalama ima vrijednosti -1, osim na svakom sedmom mjestu prve sporedne dijagonale gdje ima vrijednost 0. Na svim ostalim mjestima A ima vrijednost 0. Matrica A se može dobiti sljedećom Matlab-ovom naredbom:

```
A = gallery('poisson',7)
```

A je dobro kondicionirana: $\kappa(A) \approx 25$. Neka je $J = \mathrm{diag}(I_{29}, -I_{20})$. Za potpunu dijagonalizaciju pozitivno definitnog para (A, J) potrebno je 9 ciklusa J-Jacobijevog algoritma i ukupno 5955 izvršenih rotacija, dok je za potvrdu pozitivne definitnosti korištenjem ideje s Geršgorinovim teoremom potrebno izvršiti 4 ciklusa s ukupno 3982 izvršenih rotacija. Primjena Geršgorinovog teorema u ovom primjeru je dala značajnu uštedu u broju izvršenih rotacija jer je nakon 4. ciklusa norma trenutne matrice reziduala $A'V' - J'V'D'$ reda $O(10^{-4})$, dok je konačna norma matrice reziduala reda $O(10^{-14})$. U ovom primjeru je duljina definitnog intervala reda $O(1)$, definitni interval je otprilike $(-0.61967, 0.4464)$, dok je $\lambda_{\min} = -7.2184$, $\lambda_{\max} = 7.4572$. Usporedbe radi, lučni algoritam s početnim vektorom e_1, gdje je e_1 prvi stupac jedinične matrice I_{49}, i potpunim pivotiranjem kod pokušaja izvršenja faktorizacije Choleskog je odmah ustanovio pozitivnu definitnost para (A, J) (prva izračunata matrica A_ϕ iz Leme 2.2 je pozitivno definitna).

Neka je sada matrica A reda 20 gusto popunjena, pozitivno definitna dana s Matlab-ovom naredbom:

```
A = gallery('prolate',20);
```

A je loše kondicionirana: $\kappa(A) = O(10^{13})$. Neka je $J = \mathrm{diag}(I_{15}, -I_5)$. Za potpunu dijagonalizaciju pozitivno definitnog para (A, J) potrebno je 12 ciklusa J-Jacobijevog algoritma i ukupno 1269 izvršenih rotacija, dok je za potvrdu pozitivne definitnosti korištenjem ideje s Geršgorinovim teoremom potrebno izvršiti 8 ciklusa s ukupno 1201 izvršenih rotacija. Primjena Geršgorinovog teorema u ovom primjeru nije dala preveliku uštedu u broju izvršenih rotacija jer nakon izvršenog 8. ciklusa, radna matrica je već poprilično dijagonalizirana jer je norma trenutne matrice reziduala $A'V' - J'V'D'$ reda $O(10^{-10})$, dok je konačna norma matrice reziduala reda $O(10^{-15})$. U ovom primjeru je duljina definitnog intervala reda $O(10^{-7})$, definitni interval je otprilike $(-5.1489e-7, 1.7888e-14)$ dok je $\lambda_{\min} = -0.9968$, $\lambda_{\max} = 1$. Usporedbe radi, lučnom algoritmu s početnim vektorom e_1, gdje je e_1 prvi stupac jedinične matrice I_{20}, i potpunim pivotiranjem kod pokušaja izvršenja faktorizacije Choleskog bilo je potrebno 11 iteracija za provjeru definitnosti para (A, J).

Sljedeća tablica sadrži srednje proteklo vrijeme u sekundama za izvršenje algoritama na danim matričnim parovima (A, J) kao gore (ne uključujući vrijeme potrebno za ispis podataka koje vraćaju algoritmi):

Vrsta matrice A	Lučni	J-Jacobi bez Geršgorina	J-Jacobi sa Geršgorinom
`poisson`	0.0031	1.2976	0.8845
`prolate`	0.0101	0.0177	0.0165.

Napominjemo da nismo računali svojstvene vektore u J-Jacobijevom algoritmu. $\diamond$

Ukoliko se želi napraviti svojstvena redukcija (ili ispitivanje definitnosti) općeg hermitskog para (A, B) s invertibilnom B, s inercijom $\mathsf{In}(B) = (m, n-m, 0)$, prvo se treba napraviti simetrična indefinitna dekompozicija

$$B = GJG^T, \quad J = \mathrm{diag}(I_m, -I_{n-m})$$

(npr. [14, 11, 13] i [75]), gdje je G invertibilna donje blok-trokutasta s dijagonalnim blokovima reda 1 ili 2, te primijeniti indefinitni J-Jacobijev algoritam na pomoćnom paru $(G^{-1}AG^{-T}, J)$. Veselić je u radu [82] naveo dvije glavne primjene indefinitnog J-Jacobijevog algoritma: dijagonalizacija jedne indefinitne simetrične matrice i rješavanje pregušenog kvadratnog svojstvenog problema. Kod obje primjene prijelaz na pomoćni par je relativno jednostavan i dane su implicitne verzije J-Jacobijevog algoritma.

Za gusto popunjene matrice A, B reda n, početni numerički trošak je $n^3/3$ računskih operacija za simetričnu indefinitnu dekompoziciju $B = GJG^T$, $2n^3$ za formiranje matrice $G^{-1}AG^{-T}$ (ako se $G^{-1}A$ dobiva rješavanjem donje trokutastog sustava

$GY = A$) te $12sn^3$ za dijagonalizaciju danog matričnog para gdje je s broj ciklusa (eng. sweep). Razvijene su i blok verzije J-Jacobijevog algoritma [73, 72]. Također, postoji mogućnost neposredne primjene indefinitnog Jacobijevog algoritma na općem hermitskom matričnom paru (A, B) iako taj algoritam još nije razvijen [26].

Napomena 2.5 Ukoliko je simetričan matrični par (A, B) pozitivno definitan s neinvertibilnim matricama A i B tada ne možemo direktno primijeniti indefinitni J-Jacobijev algoritam. Neka je μ proizvoljan realan broj koji nije svojstvena vrijednost para (A, B). Tada je matrica $A - \mu B$ invertibilna te neka je njena simetrična indefinitna dekompozicija dana s

$$A - \mu B =: GJG^T, \quad J = \mathrm{diag}(I_m, -I_{n-m}). \tag{2.2}$$

Tada vrijedi sljedeći niz ekvivalentnih jednakosti

$$\begin{aligned}
(A - \mu B)x &= (\lambda - \mu)Bx \\
Bx &= \frac{1}{\lambda - \mu}(A - \mu B)x \\
Bx &= \frac{1}{\lambda - \mu}GJG^T x \\
G^{-1}BG^{-T}y &= \frac{1}{\lambda - \mu}Jy, \quad \text{gdje je } y := G^T x.
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Dakle, ako je (λ, x) svojstveni par od (A, B) i $\mu \notin \sigma(A, B)$ tada je $(1/(\lambda - \mu), x)$ svojstveni par od $(B, A - \mu B)$, te je $(1/(\lambda - \mu), y)$ svojstveni par od $(G^{-1}BG^{-T}, J)$. Sada se indefinitni J-Jacobijev algoritam može primijeniti na paru $(G^{-1}BG^{-T}, J)$. Ako je $A - \lambda_0 B \succ 0$, tj. (A, B) je pozitivno definitan matrični par, tada vrijedi

$$(A - \mu B) - (\lambda_0 - \mu)B \succ 0. \tag{2.4}$$

Ukoliko je $\lambda_0 < \mu$ tada dijeleći (2.4) s pozitivnim brojem $-(\lambda_0 - \mu)$ slijedi

$$B - \frac{1}{\lambda_0 - \mu}(A - \mu B) \succ 0,$$

tj. matrični par $(B, A - \mu B)$ je pozitivno definitan s definitnim pomakom $\frac{1}{\lambda_0 - \mu}$. Slično, ukoliko je $\lambda_0 > \mu$ slijedi da je matrični par $(B, A - \mu B)$ negativno definitan s definitnim pomakom $\frac{1}{\lambda_0 - \mu}$. Vrijedi i obrat tih tvrdnji. Ukratko, ako su A i B neinvertibilne, koristeći proizvoljni $\mu \notin \sigma(A, B)$ prelazimo na pomoćni par $(B, A - \mu B)$. Pri tome prijelazu se definitnost čuva, ali ne nužno i pozitivna, odnosno negativna. $\diamond$

Eksperiment 2.6 U ovom primjeru koristimo klasu matričnih parova koju je predložio Moon u [54, Eks.3.0, str.80], a korištena je i u [29, Eks.2, str.1144] definiranih u

Matlab-ovoj notaciji

```
V=gallery('triw',n,1,2);
theta=zeros(n,1);
for i=2:n, theta(i)=theta(i-1)+pi/2^(i-1);end
A=V'*diag(sin(theta))*V;
B=V'*diag(cos(theta))*V;
```

A_n je pozitivno semi-definitna i neinvertibilna, a B je neinvertibilna i indefinitna, par (A_n, B_n) je pozitivno definitan. Za $n \geq 54$ je par (A_n, B_n) unutar udaljenosti reda ϵ od indefinitnog para jer je slika funkcije f iz (2.1) luk duljine skoro π. Lučni algoritam koristi određenu toleranciju pri određivanju duljine trenutnog luka luk$[a_k, b_k]$: ako je $\pi - \texttt{tol} \leq \theta[a_k, b_k] \leq \pi$ tada lučni algoritam staje s naznakom da je zadani matrični par unutar udaljenosti `tol` od indefinitnog para. Za $n = 60$ te $\mu = 0.1$ primijenimo indefinitni J-Jacobijev algoritam na paru $(G^{-1}B_{60}G^{-T}, J)$ (v. (2.2) i (2.3)). Nakon 18 izvršenih ciklusa Jacobijev algoritam je dao potvrdu pozitivne definitnosti danog para dijagonalizirajući ga s normom greške reda $O(10^{-13})$. Naime, Geršgorinov teorem nije uspio pomoći ubrzati odluku jer je definitni interval jako uzak:

$$(-9.999999999999998, -9.999999999999943).$$

Za sredinu λ_d definitnog intervala vrijedi $\kappa(G^{-1}B_{60}G^{-T} - \lambda_d J) = O(10^{14})$. Lučni algoritam s potpunim pivotiranjem je detektirao nakon dva pokušaja izvršenja faktorizacije Choleskog da je par $(G^{-1}B_{60}G^{-T}, J)$ unutar udaljenosti $\texttt{tol} = 60 \cdot 2^{-53}$ od indefinitnog para. $\diamond$

3. Metoda "divide & conquer"

   U svojoj doktorskoj disertaciji [36] Keller je 1994. predstavila algoritam koji rješava cijeli generalizirani svojstveni problem pozitivno definitnog matričnog para (A, J) u kojem je A realna simetrična tridijagonalna, a $J = \text{diag}\{\pm 1\}$. Taj se algoritam temelji na principu "divide & conquer" ("podijeli pa vladaj"). U "divide" koraku se originalni GSP dijeli na dva manja potproblema koji se rješavaju samostalno. Keller vrši dijeljenje GSP-a na manje potprobleme sve dok ne dođe do GSP-a reda 1 ili reda 2. U "conquer" koraku se pojedinačna rješenja dva odgovarajuća potproblema spajaju zajedno tako da daju rješenje potproblema (duplo većeg reda) od kojeg su nastali. "Conquer" koraci se vrše sve dok se ne dođe do rješenja originalnog GSP-a.

   Neka je (A, J) originalni pozitivno definitni matrični par reda n. Metodu ćemo ukratko opisati na temelju jedne podijele u "divide" koraku. Tridijagonalnu A zapišemo u obliku

$$A = T - \rho b b^T, \quad T = \text{diag}(T_1, T_2)$$

gdje su $\rho \in \mathbb{R}$, $b \in \mathbb{R}^n$, T_1, T_2 kvadratne tridijagonalne matrice reda m_1, m_2 tim redom ($m_1 + m_2 = n$). Keller ρ i b bira tako da matrični parovi (T_1, J_1) i (T_2, J_2) budu pozitivno definitni gdje je $J = \mathrm{diag}(J_1, J_2)$. Neka je D_i dijagonalna matrica svojstvenih vrijednosti, a Q_i J_i-ortonormirana matrica svojstvenih vektora GSP-a

$$T_i x = \lambda J_i x, \quad i = 1, 2.$$

Tada slijedi istovremena dijagonalizacija para (T, J) :

$$Q^T T Q = D \text{ i } Q^T J Q = J \quad \text{gdje je} \quad Q := \mathrm{diag}(Q_1, Q_2),\ D := \mathrm{diag}(D_1, D_2) \tag{2.5}$$

čime završava "divide" korak. Kako je GSP

$$Ax = (T - \rho b b^T)x = \lambda J x$$

ekvivalentan GSP-u

$$(D - \rho z z^T)y = \lambda J y, \quad z := J Q^T b,\ y := (JQ)^T x \tag{2.6}$$

gdje su D, Q iz (2.5), tada se u "conquer" koraku rješava GSP (2.6) čime se dobiva rješenje originalnog GSP-a para (A, J) (naime, vrijedi $x = QJy$). Uočimo da je matrica $D - \rho z z^T$ perturbacija dijagonalne matrice dijadom (matricom ranga jedan), pa Keller svojstvene vrijednosti matričnog para $(D - \rho z z^T, J)$ dobiva kao nultočke određene racionalne funkcije.
Kellerina metoda je pogodna i za male i za jako velike matrične parove, te se može paralelizirati. Ukoliko se na početku ne pretpostavi pozitivna definitnost originalnog matričnog para (A, J) s realnom simetričnom tridijagonalnom A i $J = \mathrm{diag}\{\pm 1\}$ Kellerina "divide & conquer" metoda može poslužiti kao algoritam za ispitivanje pozitivne definitnosti. Keller napominje da se u numeričkim eksperimentima koje je provela, indefinitnost otkriva dosta brzo, obično u "divide" koracima za potprobleme reda 2. Kako sama Keller napominje, njezina "divide & conquer" metoda sadrži problematične korake u numeričkoj implementaciji (ako su bliske svojstvene vrijednosti podmatrica).
Keller je također predstavila "divide & conquer" tip metode koji rješava cijeli generalizirani svojstveni problem pozitivno definitnog matričnog para (A, J) u kojem je A realna simetrična tridijagonalna s nekoliko dodatno popunjenih redaka i stupaca, a $J = \mathrm{diag}\{\pm 1\}$. Taj algoritam služi i kao algoritam za ispitivanje pozitivne definitnosti, ukoliko se ona ne pretpostavi na početku.

4. Stohastička metoda
   U svojoj doktorskoj disertaciji [36, Odjeljak 3.6] Keller je 1994. predstavila sto-

hastičku metodu za ispitivanje definitnosti simetričnog para (A, B) koja ujedno služi i za određivanje definitnog intervala ukoliko se radi o definitnom matričnom paru. Naime, ako je par (A, B) pozitivno definitan, onda postoji $\lambda_0 \in \mathbb{R}$ takav da za sve $x \neq 0$ vrijedi $x^T(A - \lambda_0 B)x > 0 \Longleftrightarrow x^T Ax > \lambda_0 x^T Bx$. Za $x^T Bx > 0$ vrijedi

$$\lambda_0 < \frac{x^T Ax}{x^T Bx} = \rho(x),$$

dok za $x^T Bx < 0$ vrijedi

$$\lambda_0 > \frac{x^T Ax}{x^T Bx} = \rho(x).$$

Dakle (usp. točku 3. Teorema 1.9 i (1.11)),

$$\lambda_1^- < \lambda_0 < \lambda_1^+$$

gdje je

$$\lambda_1^- := \max_{x^T Bx<0} \frac{x^T Ax}{x^T Bx}, \quad \lambda_1^+ := \min_{x^T Bx>0} \frac{x^T Ax}{x^T Bx}$$

(u slučaju da nema takvih x za λ_1^- ili λ_1^+ onda $\lambda_1^- := -\infty$, odnosno $\lambda_1^+ := +\infty$). Za dani smjer x novi smjer biramo u obliku

$$x' = x + tu, \quad t \in \mathbb{R}.$$

Generira se slučajan normiran smjer u. Ako je vrijednost $\rho(x + tu)$ poboljšanje od $\rho(x)$ (u smislu da ako je x B-negativan i ako je $x + tu$ B-negativan i $\rho(x + tu) > \rho(x)$) za neki mali prirast t, prihvaćamo taj smjer; u suprotnom, probamo sa suprotnim smjerom $-u$. Ako ni to ne donese nikakav napredak, generira se neki novi slučajni smjer. Ako smo pronašli odgovarajući smjer, onda se krećemo u tom smjeru, ali s duplim korakom t. Tek kada se dogodi pogoršanje vratimo se s pola koraka nazad. Također, Keller navodi da se smjer u može birati deterministički, npr. kao smjer gradijenta. Ovu stohastičku metodu je lagano implementirati, no slabo je efikasna.

5. Metoda koordinatne relaksacije

   Keller je također u [36, Odjeljak 3.6] predstavila efikasniju metodu od stohastičke metode. Ta druga metoda bazirana je na kombinaciji Schwartzove metode koordinatne relaksacije [71] iz 1974. i teorijske spoznaje u radu Kovač-Striko i Veselić [41] iz 1995. (neke tvrdnje iz toga rada naveli smo u Potpoglavlju 1.2) u kojem je dana povezanost definitnosti para (A, B) s postojanjem minimuma funkcije $\operatorname{tr}(X^T AX)$, $X \in \mathbb{R}^{n\times(k_+ +k_-)}$ uz uvjet $X^T BX = \operatorname{diag}(I_{k_+}, -I_{k_-})$, $k_+ + k_- \leq n$. Za razliku od stohastičke metode, sada je formulacija optimizacijskog problema jednostavnija. Naime, da bi se utvrdilo

$$\begin{aligned} \min x^T Ax \text{ pod uvjetom } x^T Bx = 1, \\ \max x^T Ax \text{ pod uvjetom } x^T Bx = -1, \end{aligned}$$

za bilo koji $x \in \mathbb{R}^n$ takav da vrijedi $x^T Bx = 1$ za minimizaciju, odnosno $x^T Bx = -1$ za maksimizaciju, tražimo novi vektor x' u obliku

$$x' = \varphi x + \gamma y, \quad \varphi, \gamma \in \mathbb{R},$$

gdje parametre φ, γ biramo tako da

$$\begin{aligned} \text{minimiziramo } x'^T Ax' \text{ pod uvjetom } x'^T Bx' = 1, \\ \text{maksimiziramo } x'^T Ax' \text{ pod uvjetom } x'^T Bx' = -1. \end{aligned} \tag{2.7}$$

Koristeći metodu Lagrangeovog multiplikatora Keller je pokazala da je optimizacijski problem (2.7) ekvivalentan primjeni Rayleigh-Ritzove procedure na potprostor $\operatorname{span} U$, gdje je $U = [x, y]$. Naime, postavimo problem uvjetne optimizacije

$$\begin{cases} f(\varphi, \gamma) \to \min, \max, \\ g(\varphi, \gamma) = 0, \end{cases}$$

za zadanu funkciju

$$f(\varphi, \gamma) := x'^T Ax' = \varphi^2 x^T Ax + 2\varphi\gamma y^T Ax + \gamma^2 y^T Ay$$

te uvjet

$$g(\varphi, \gamma) := x'^T Bx' = \varphi^2 x^T Bx + 2\varphi\gamma y^T Bx + \gamma^2 y^T By \mp 1.$$

Nužni uvjeti za uvjetni ekstrem

$$\frac{\partial f(\varphi, \gamma)}{\partial \varphi} = \lambda \frac{\partial g(\varphi, \gamma)}{\partial \varphi} \;\text{ i }\; \frac{\partial f(\varphi, \gamma)}{\partial \gamma} = \lambda \frac{\partial g(\varphi, \gamma)}{\partial \gamma}$$

gdje je λ Lagrangeov multiplikator, vode do 2×2 GSP-a

$$\begin{bmatrix} x^T Ax & x^T Ay \\ y^T Ax & y^T Ay \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi \\ \gamma \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x^T Bx & x^T By \\ y^T Bx & y^T By \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi \\ \gamma \end{bmatrix}$$

uz $x'^T Bx' = \pm 1$.

Stoga je metodu koordinatne relaksacije za ispitivanje pozitivne definitnosti realnog simetričnog matričnog para i određivanje definitnog intervala Keller sažela u sljedećih 5 koraka.

(i) Biraju se početni vektori x_1 takav da $x_1^T B x_1 = 1$ i x_2 takav da $x_2^T B x_2 = -1$. Definira se početni interval $\mathcal{I}_{poc} = \langle -\infty, +\infty \rangle$.

(ii) Određuju se iteracijski vektori y_1, y_2. Tipičan izbor je $y_i = e_j$, $i = 1, 2$ gdje je e_j j-ti stupac jedinične matrice I_n, $j = 1, \ldots, n$. Druga je mogućnost izabrati vektor y_i kao neki slučajni smjer ili kao smjer gradijenta: $y_i = (x_i^T B x_i) A x_i - (x_i^T A x_i) B x_i$, $i = 1, 2$.

(iii) Rješava se 2×2 GSP

$$\begin{bmatrix} x^T A x & x^T A y \\ y^T A x & y^T A y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi \\ \gamma \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x^T B x & x^T B y \\ y^T B x & y^T B y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi \\ \gamma \end{bmatrix},$$

tj.

$$A_p \begin{bmatrix} \varphi \\ \gamma \end{bmatrix} = \lambda B_p \begin{bmatrix} \varphi \\ \gamma \end{bmatrix}$$

za $x = x_1, y = y_1$ i za $x = x_2, y = y_2$. Ukoliko barem jedan komprimirani par (A_p, B_p) ima kompleksne svojstvene vrijednosti, metodu zaustavljamo sa zaključkom da je zadani par (A, B) indefinitan. U suprotnom, za $x = x_1, y = y_1$ ($x = x_2, y = y_2$) odabiremo manju (veću) realnu svojstvenu vrijednost sa svojstvenim vektorom $z \in \mathbb{R}^2$, takvim da

$$z^T B_p z = 1 \quad (z^T B_p z = -1)$$

i označimo ju s λ_+ (λ_-). Ukoliko je $\lambda_- < \lambda_+$ definiramo interval $\mathcal{I}_{def} := \langle \lambda_-, \lambda_+ \rangle$ te pravimo (v. Teorem 1.26) presjek intervala $\mathcal{I}_{def}$ i $\mathcal{I}_{poc}$:

$$\mathcal{I}_{poc} := \mathcal{I}_{poc} \cap \mathcal{I}_{def}.$$

Ukoliko je novi interval $\mathcal{I}_{poc}$ prazan ili je $\lambda_+ \leq \lambda_-$ otkrivena je indefinitnost zadanog matričnog para (A, B) i metoda se zaustavlja.

(iv) Definiraju se novi vektori x_1^{novi} i x_2^{novi} kao Ritzovi vektori: $x_i^{novi} = [x_i, y_i] z_i = \varphi_i x_i + \gamma_i y_i$, gdje su $z_i = [\varphi_i, \gamma_i]^T$, $i = 1, 2$ prethodno izračunati željeni svojstveni vektori komprimiranih parova (A_p, B_p). Za tako generirane vektore x_i^{novi}, $i = 1, 2$ vrijedi

$$(x_1^{novi})^T B x_1^{novi} = 1, \quad (x_2^{novi})^T B x_2^{novi} = -1.$$

(v) Dokle god se ne otkrije indefinitnost zadanog matričnog para ili se definitni interval ne odredi dovoljno precizno, ponavljaju se koraci (ii), (iii) i (iv).

U Odjeljku 2.2.2 ove disertacije generaliziramo Kellerinu metodu koordinatne relaksacije.

6. Metoda bisekcije i metoda nivo skupova
   Higham, Tisseur i Van Dooren su 2002. u radu [33] razvili metodu bisekcije za određivanje intervala u kojem se nalazi Crawfordov broj hermitskog matričnog para. Ukoliko se, na samom početku, ne pretpostavlja definitnost para, algoritam se može iskoristiti kao algoritam za ispitivanje definitnosti danog para. Čim se tokom računanja ustanovi da je lijevi rub intervala, što predstavlja jednu donju među za Crawfordov broj, pozitivan, algoritam staje s naznakom da je par definitan. Ukoliko desni rub, u toku računanja postane manji ili jednak 0, zaključuje se da je par indefinitan. Ako je Crawfordov broj 0 ili jako blizu 0, bit će potrebno puno iteracija za određivanje je li par definitan ili nije. Svaka iteracija ovog algoritma je skupa, naime zahtjeva se računanje svih svojstvenih vrijednosti nehermitskog kvadratnog svojstvenog problema reda n i do na $2n$ računanja najmanje svojstvene vrijednosti hermitske matrice. U istom su radu, autori razvili efikasniju metodu nivo skupova. U toj je metodi potrebno računanje svih svojstvenih vrijednosti samo jednog nehermitskog kvadratnog svojstvenog problema reda n te se zatim provjerava jednostavan uvjet i ustanovljuje je li par definitan ili nije. Ukoliko je par definitan, može se nastaviti s određivanjem monotono rastućih donjih međa (ali ne i gornjih) Crawfordovog broja.

2.2 Ispitivanje definitnosti pomoću potprostora

U ovom potpoglavlju predlažemo nove algoritme ispitivanja definitnosti danog hermitskog matričnog para. Naime, za opći hermitski matrični par (A, B) uz invertibilnu B imamo sljedeće mogućnosti za B-predznake svojstvenih vrijednosti:

DEFINITAN PAR	INDEFINITAN PAR
a) B indefinitna: $- - - + + + +$	i) kompleksne svoj. vrij.
b) B indefinitna: $+ + + + - - -$	ii) realne svoj.vrij.: $- + - - + + -$
c) B poz.def.: $+ + + + + + +$	iii) realne svoj.vrij.: neki $+$ i $-$ se podudaraju
d) B neg.def.: $- - - - - -$	

Ukoliko je B neinvertibilna, a par je definitan, uz realne svojstvene vrijednosti tipa a)-d) imamo još i beskonačne svojstvene vrijednosti.

Novi algoritmi, koje predlažemo u sljedećim odjeljcima, ispitivanjem malih komprimiranih parova koji nastaju korištenjem test-potprostora malih dimenzija, ispituju mogući poredak B-predznaka svojstvenih vrijednosti zadanog velikog hermitskog matričnog para (A, B). Algoritmi su iterativni, a cilj algoritama jest provjeriti hoće li doći do miješanja B-predznaka ili kompleksnih svojstvenih vrijednosti, što znači da je (A, B) indefinitan par.

Ukoliko se to ne dogodi, u slučaju da je dosadašnji poredak B-predznaka oblika

$$- - - \underbrace{\quad}_{\mathcal{I}_{pd}} + + ++$$

ispituje se pozitivna definitnost matrice $A - \theta_0 B$ za neki θ_0 iz intervala $\mathcal{I}_{pd}$, a ukoliko je dosadašnji poredak B-predznaka oblika

$$+ + + + \underbrace{\quad}_{\mathcal{I}_{nd}} - - -$$

ispituje se negativna definitnost matrice $A - \theta_0 B$ za neki θ_0 iz intervala $\mathcal{I}_{nd}$. U Odjeljku 2.2.1 predlažemo jednostavne algoritme ispitivanja definitnosti korištenjem najjednostavnijih test-potprostora: iterativno ispitivanje svih glavnih podmatrica reda 1 ili 2. Kvalitetniji izbor test-potprostora predstavljen je u algoritmu ispitivanja potprostora iz Odjeljka 2.2.2. Algoritam ispitivanja potprostora posebno je pogodan za velike rijetko popunjene vrpčaste matrične parove.

2.2.1 Ispitivanje pomoću podmatrica

Neka je (A, B) zadani hermitski matrični par reda n. Cilj algoritama u ovom odjeljku je korištenjem nužnog uvjeta iz Leme 1.27 i 1.28 provjeriti sljedeće:

i) par (A, B) je indefinitan,

ii) par (A, B) nije pozitivno definitan,

iii) par (A, B) nije negativno definitan,

i to koristeći najjednostavnije matrice U: $U = [e_i]$, $i = 1, \ldots, n$ te $U = [e_i, e_j]$, $i, j = 1, \ldots, n$, $i \neq j$, gdje je e_i i-ti stupac jedinične matrice I_n. Prvo izvodimo algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata, a zatim algoritam ispitivanja glavnih podmatrica reda 2.

Ispitivanje dijagonalnih elemenata

Ideja ispitivanja dijagonalnih elemenata u svrhu bržeg otkrivanja indefinitnosti danog matričnog para (A, J) gdje je $J = \operatorname{diag}\{\pm 1\}$ dana je kao jedan od kriterija za provedbu indefinitnog J-Jacobijevog algoritma u [82, Odjeljak 2]. Tu ideju ovdje generaliziramo za opći hermitski par.

Ako je par (A, B) pozitivno definitan, onda je i *svaki* komprimirani par $(U^H AU, U^H BU)$ za $U = [e_i]$, $i = 1, \ldots, n$, gdje je e_i i-ti stupac jedinične matrice I_n, također pozitivno definitan. Za dani e_i, komprimirani par je par reda 1 pa definiramo

$$(a_{ii}, b_{ii}) := (e_i^H A e_i, e_i^H B e_i),$$

tj. imamo par dijagonalnih elemenata matrica A, B. Ukoliko je par (A, B) pozitivno definitan s $\mathsf{In}(B) \geq (1, 1, 0)$, gdje se nejednakost podrazumijeva po elementima i s konačnim svojstvenim vrijednostima kao u (1.8) tada vrijedi

$$\max_{b_{jj}<0} \frac{a_{jj}}{b_{jj}} \leq \lambda_1^- < \lambda_1^+ \leq \min_{b_{ii}>0} \frac{a_{ii}}{b_{ii}} \tag{2.8}$$

Uočimo da je kod matričnog para reda 1, njegova jedina svojstvena vrijednost kvocijent a_{ii}/b_{ii}.

Ako vrijedi

$$a_{ii} < 0 \text{ i } b_{ii} = 0 \text{ za neki } i = 1, 2, \ldots, n \tag{2.9}$$

tada par (A, B) nije pozitivno definitan. Naime, da bi matrični par $(a, 0)$ reda 1 mogao biti pozitivno definitan, tj. $a - \lambda_0 \cdot 0 \succ 0$ nužno je da je $a > 0$.

Ako vrijedi

$$a_{ii} = 0 \text{ i } b_{ii} = 0 \text{ za neki } i = 1, 2, \ldots, n \tag{2.10}$$

tada je par (A, B) indefinitan jer je njegov Crawfordov broj jednak 0 (v. Definiciju 1.2). U implementaciji algoritma umjesto uvjeta (2.10) koristimo oslabljeni uvjet:

$$\max\{a_{ii}/\|A\|_\infty, b_{ii}/\|B\|_\infty\} \leq \epsilon, \tag{2.11}$$

gdje je ϵ jedinična greška zaokruživanja.

Iz (2.8) slijedi nužan uvjet pozitivne definitnosti para (A, B) s indefinitnom B : svi kvocijenti dijagonalnih elemenata a_{ii}/b_{ii} za koje je $b_{ii} > 0$ moraju biti veći od svih kvocijenata dijagonalnih elemenata a_{jj}/b_{jj} za koje je $b_{jj} < 0$. Ako je nužan uvjet za pozitivnu definitnost para ispunjen (time se automatski isključuje negativna definitnost), zaključujemo da postoji mogućnost da je par pozitivno definitan i dobivamo interval unutar kojeg se nalazi njegov definitan interval, ukoliko se zaista radi o pozitivno definitnom paru. Taj interval dobijemo na sljedeći način:

$$\Big\langle \max_{b_{jj}<0} \frac{a_{jj}}{b_{jj}}, \min_{b_{ii}>0} \frac{a_{ii}}{b_{ii}} \Big\rangle. \tag{2.12}$$

Ako je duljina intervala u (2.12) manja ili jednaka od neke zadane tolerancije `tol` zaključujemo da je par (A, B) blizu pozitivno semidefinitnog para. Interval (2.12) je formiran u slučaju da B ima barem jedan pozitivan i barem jedan negativan dijagonalni element.

Gornja rasprava vodi nas do Algoritma 2.1. Ukoliko niti na jednom dijagonalnom paru elemenata nije utvrđena indefinitnost zadanog matričnog para, a matrica B ima sve nenegativne ili sve nepozitivne dijagonalne elemente, onda ne možemo formirati interval (2.12). U tom slučaju algoritam na izlazu može vratiti interval

$$\Big\langle -\infty, \min_{b_{ii}>0} \frac{a_{ii}}{b_{ii}} \Big\rangle \text{ odnosno } \Big\langle \max_{b_{jj}<0} \frac{a_{jj}}{b_{jj}}, +\infty \Big\rangle.$$

Algoritam 2.1 Algoritam za ispitivanje pozitivne definitnosti hermitskog matričnog para pomoću dijagonalnih elemenata

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: koeficijenti hermitskog matričnog para (A, B); tolerancija `tol`;
Izlaz: Interval $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{I}_d$ i svojstvo para (A, B) : (samo jedno od sljedećeg) pozitivno definitan, nije pozitivno definitan, možda pozitivno definitan, blizu pozitivno semidefinitnog, indefinitan

$I_d := +\infty$, $I_\ell := -\infty$
Iteracija:
za $i = 1, \dots, n$ **čini**
  ako $b_{ii} = 0$ **tada**
    ako je $a_{ii} < 0$, kraj ((A, B) nije pozitivno definitan);
    ako je $a_{ii} = 0$, kraj ((A, B) je indefinitan).
  inače
    ako je $b_{ii} > 0$, definirati $\mathcal{I}_d := \min\{\, \dfrac{a_{jj}}{b_{jj}} : b_{jj} > 0, j = 1, \dots, i\,\}$;
    ako je $b_{ii} < 0$, definirati $\mathcal{I}_\ell := \max\{\, \dfrac{a_{jj}}{b_{jj}} : b_{jj} < 0, j = 1, \dots, i\,\}$;
  kraj ako
  Ako je $\mathcal{I}_\ell \geq \mathcal{I}_d$, kraj ($(A, B)$ nije pozitivno definitan).
  Ako je $\mathcal{I}_\ell < \mathcal{I}_d$ i $\mathcal{I}_d - \mathcal{I}_\ell <$ `tol` kraj ((A, B) je blizu pozitivno semidefinitnog).
kraj za

Algoritam 2.2 Algoritam za ispitivanje negativne definitnosti hermitskog matričnog para pomoću dijagonalnih elemenata

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: koeficijenti hermitskog matričnog para (A, B); tolerancija `tol`;
Izlaz: Interval $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{I}_d$ i svojstvo para (A, B) : (samo jedno od sljedećeg) negativno definitan, nije negativno definitan, možda negativno definitan, blizu negativno semidefinitnog, indefinitan

$I_d := +\infty$, $I_\ell := -\infty$
Iteracija:
za $i = 1, \dots, n$ **čini**
  ako $b_{ii} = 0$ **tada**
    ako je $a_{ii} > 0$, kraj ((A, B) nije negativno definitan);
    ako je $a_{ii} = 0$, kraj ((A, B) je indefinitan).
  inače
    ako je $b_{ii} > 0$, definirati $\mathcal{I}_\ell := \max\{\, \dfrac{a_{jj}}{b_{jj}} : b_{jj} > 0, j = 1, \dots, i\,\}$;
    ako je $b_{ii} < 0$, definirati $\mathcal{I}_d := \min\{\, \dfrac{a_{jj}}{b_{jj}} : b_{jj} < 0, j = 1, \dots, i\,\}$;
  kraj ako
  Ako je $\mathcal{I}_\ell \geq \mathcal{I}_d$, kraj ($(A, B)$ nije negativno definitan).
  Ako je $\mathcal{I}_\ell < \mathcal{I}_d$ i $\mathcal{I}_d - \mathcal{I}_\ell <$ `tol` kraj ((A, B) je blizu negativno semidefinitnog).
kraj za

U implementaciji Algoritma 2.1 brojeve $\mathcal{I}_d$, $\mathcal{I}_\ell$ iz Linije 8, 9, tim redom, dobivamo tako što uspoređujemo zadnji izračunati broj $\mathcal{I}_d$, odnosno $\mathcal{I}_\ell$ s trenutnim kvocijentom $\frac{a_{ii}}{b_{ii}}$ (ne pamtimo sve kvocijente $\frac{a_{jj}}{b_{jj}}$ za sve $j = 1, \ldots, i$). Također, vektori e_{i_M}, e_{i_m} za koje su i_M, i_m indeksi za koje se postiže maksimum, minimum, tim redom, u intervalu (2.12) mogu poslužiti kao stupci matrice $X^{(0)}$ početnih aproksimacija u Algoritmu ispitivanja potprostora izvedenom u Odjeljku 2.2.2.

Analognu raspravu kao gore možemo provesti i za ispitivanje negativne definitnosti zadanog hermitskog matričnog para što dovodi do Algoritma 2.2.

Napomena 2.7 Ako je matrični par (A, B) takav da A na dijagonali ima barem jedan nul-element ili barem jedan pozitivan i barem jedan negativan element, a B na dijagonali ima sve nul-elemente, onda će Algoritam 2.1 ili 2.2 sigurno otkriti indefinitnost para (A, B).

Napomena 2.8 Algoritme 2.1 i 2.2 možemo ujediniti u jedan algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata, kako smo i implementirali u Matlab-u. Ukoliko se tijekom izvršavanja tog ujedinjenog algoritma ustanovi da su prekršena oba nužna uvjeta i za pozitivnu i za negativnu definitnost, zaključujemo da zadani matrični par nije definitan i algoritam staje. Kada algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata završi, korisnik dobiva jedan od sljedećih osam odgovora:

i) Par (A, B) je indefinitan.

ii) Par (A, B) nije pozitivno definitan.

iii) Par (A, B) nije negativno definitan.

iv) Par (A, B) je možda pozitivno definitan.

v) Par (A, B) je možda negativno definitan.

vi) Par (A, B) je možda definitan.

vii) Par (A, B) je blizu pozitivno semidefinitnog para.

viii) Par (A, B) je blizu negativno semidefinitnog para.

Eksperiment 2.9 Neka su A_s i B_s proizvoljne realne simetrične matrice (kompleksne hermitske) reda $n - 2r - 1$ za neki $r \geq 1$ i $2r + 1 \leq n$. Promotrimo matrice A_1, B_1 reda n:

$$A_1 = \begin{bmatrix} A(r,r) & \\ & A_s \end{bmatrix}, \quad B_1 = \begin{bmatrix} B(r,r) & \\ & B_s \end{bmatrix},$$

gdje su matrice $A(r,r), B(r,r)$ reda $2r+1$ dane s

$$A(r,r) = \begin{bmatrix} & A(r)^T \\ A(r) & \end{bmatrix}, \quad B(r,r) = \begin{bmatrix} & B(r)^T \\ B(r) & \end{bmatrix},$$

a pravokutne $r \times r+1$ matrice $A(r), B(r)$ dane s

$$A(r) = \begin{bmatrix} 0 & \\ \vdots & I_r \\ 0 & \end{bmatrix}, \quad B(r) = \begin{bmatrix} & 0 \\ I_r & \vdots \\ & 0 \end{bmatrix}.$$

Obje matrice A_1 i B_1 su neinvertibilne i par (A_1, B_1) je singularan par (za dokaz vidjeti [85, Teorem, str.232; Teorem, str.241] i [84, Teorem 3.1, str.160]). Ukoliko u lučnom algoritmu, kao početni vektor x uzmemo bilo koji vektor $e_1, \ldots, e_{2r+1}$, gdje je e_j j-ti stupac jedinične matrice I_n, algoritam odmah otkriva indefinitnost para jer je pronađen kvocijent 0/0 dijagonalnih elemenata. Također, naš algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata iz Napomene 2.8 odmah otkriva indefinitnost para, tj. na prvom paru dijagonalnih elemenata. No, ukoliko gledamo kongruentan singularan par $(A, B) = (QA_1Q^H, QB_1Q^H)$ za neku invertibilnu matricu Q, algoritmi će odraditi nešto posla prije davanja odluke o indefinitnosti para (A, B). Zadat ćemo konkretne matrice A_s, B_s i Q te usporediti lučni algoritam s našim algoritmom ispitivanja dijagonalnih elemenata.
Neka je Q ortogonalna matrica zadana Matlab-ovom naredbom

```
Q = gallery('orthog',n,1),
```

a $A_s = B_s$ realna simetrična indefinitna Hankelova matrica zadana Matlab-ovom naredbom

```
As=gallery('ris',n-2*r-1).
```

Za $n = 100$ i $r = 25$ lučni algoritam u četvrtoj iteraciji otkriva nedefinitnost para (A, B) (uz početni vektor e_1, navodimo korake u kojima je prekinuta faktorizacija Choleskog s potpunim pivotiranjem određene 100×100 matrice: 31,32,34,33) sa zaključkom da je duljina luka dulja od π, dok naš algoritam na trećem paru dijagonalnih elemenata otkriva da par (A, B) nije negativno definitan, a na petom paru dijagonalnih elemenata otkriva da par nije niti pozitivno definitan, te se time zaključuje indefinitnost para (A, B). Ukoliko za istu matricu Q, definiramo matrice $A_s = B_s$ u Matlab-ovoj notaciji s

```
As=-diag(1:n-2*r-1)
```

lučni algoritam u četvrtoj iteraciji otkriva nedefinitnost para (A, B) (zaključkom da je duljina luka dulja od π) dok naš algoritam daje odgovor da je par (A, B) možda definitan jer su svi dijagonalni elementi matrice B negativni, a nije prekršen niti nužan uvjet za pozitivnu niti za negativnu definitnost.

Ispitivanje 2×2 glavnih podmatrica

Ako je matrični par (A, B) pozitivno definitan, onda je i *svaki* komprimirani par $(U^H AU, U^H BU)$ za $U = [e_i, e_j]$, $i, j = 1, \ldots, n$, $i < j$, gdje je e_i i-ti stupac jedinične matrice I_n, također pozitivno definitan. Za dane različite e_i, e_j komprimirani par je par reda 2 pa definiramo

$$A_p := \begin{bmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ \overline{a_{ij}} & a_{jj} \end{bmatrix}, \quad B_p := \begin{bmatrix} b_{ii} & b_{ij} \\ \overline{b_{ij}} & b_{jj} \end{bmatrix}, \tag{2.13}$$

tj. A_p, B_p su neke glavne podmatrice, uzete s istim indeksima za retke i stupce, matrica A, B, tim redom. Cilj nam je ispitivanjem svih glavnih 2×2 podmatrica dati određeni zaključak o (in)definitnosti para (A, B). Glavne podmatrice možemo pregledavati prema sljedećoj petlji (Matlab-ova notacija)

```
for i=1:(n-1)
    for j=(i+1):n
    ...
    end
end
```

što ukupno daje $n(n-1)/2$ pregleda. Ukoliko je red matrica n velik, ne moramo nužno ispitati sve glavne 2×2 podmatrice da bismo dobili neku informaciju o zadanom paru. Npr. ako su matrice A, B vrpčaste, BSO iste širine vrpce, onda predlažemo ispitivanje samo po glavnoj vrpci. Ukoliko su npr. obje matrice tridijagonalne, potrebno je tada napraviti samo $n - 1$ pregled, tj. pregledavamo prema sljedećoj petlji (Matlab-ova notacija)

```
for i=1:(n-1)
    j=i+1;
    ...
end
```

Kako je (A_p, B_p) matrični par reda 2, svojstvene vrijednosti možemo računati koristeći definiciju, tj. λ je svojstvena vrijednost para (A_p, B_p) ako je

$$0 = \det(A_p - \lambda B_p) =: a\lambda^2 + b\lambda + c, \tag{2.14}$$

gdje je

$$a = \det(B_p),\ b = -\operatorname{tr}(A \cdot \operatorname{adj}(B)),\ c = \det(A_p) \quad (a, b, c \in \mathbb{R})$$

i

$$\operatorname{adj}(B) = \begin{bmatrix} b_{22} & -b_{12} \\ -\overline{b_{12}} & b_{11} \end{bmatrix}$$

adjunkta matrice B_p. Razlikovat ćemo slučaj kada je B_p invertibilna, od onog kada je B_p neinvertibilna matrica.

Neka je B_p hermitska neinvertibilna nenul-matrica. Tada B_p ne može imati dvostruku svojstvenu vrijednost 0. Ukoliko je (A_p, B_p) regularan par, tada taj par ima jednu beskonačnu i jednu realnu svojstvenu vrijednost ili dvije beskonačne svojstvene vrijednosti. Kako je po pretpostavci $a = \det(B_p) = 0$ iz (2.14) slijedi

$$b\lambda + c = 0.$$

Ukoliko je dodatno i $b = c = 0$ tada je par (A_p, B_p) singularan par, pa je i indefinitan. Ukoliko je $b \neq 0$ i $c \neq 0$ tada je par (A_p, B_p) regularan par s realnom svojstvenom vrijednosti $-c/b$, dok ukoliko je $c \neq 0$ i $b = 0$ regularan par (A_p, B_p) ima obje beskonačne svojstvene vrijednosti te je nužno indefinitan (kada bi bio definitan par, bio bi i dijagonalizibilan, pa bi postojala invertibilna W takva da je $W^H A_p W = \operatorname{diag}(\pm 1, \pm 1)$ i $W^H B_p W = \operatorname{diag}(0, 0)$, a ova druga jednakost povlači da je $\mathsf{In}\, B_p = (0, 0, 2)$, tj. da B_p ima dvostruku svojstvenu vrijednost nula, a to je u kontradikciji s pretpostavkom da je B_p nenul-matrica).
Za određivanje B_p-predznaka realne svojstvene vrijednosti regularnog para (A_p, B_p), potrebno je odrediti inerciju matrice B_p. Kako je ona hermitska neinvertibilna nenul-matrica to je B_p pozitivno semi-definitna ili negativno semi-definitna. Dakle, jedna svojstvena vrijednost matrice B_p je nula, a druga je ili pozitivna ili negativna te je jednaka $\operatorname{tr}(B_p)$. Ukoliko je dakle, $\operatorname{tr}(B_p) > 0\,(< 0)$, to je realna svojstvena vrijednost para (A_p, B_p) B_p-pozitivna (B_p-negativna).
Iako u matričnom paru (A_p, B_p) izravno koristimo matrične elemente zadanih matrica A i B, možda je kod njihovih spremanja u memoriju došlo do grešaka uzrokovanih zaokruživanjem, pa B_p nije neinvertibilna u aritmetici konačne preciznosti, iako bi zapravo trebala biti neinvertibilna zbog originalnih matričnih elemenata. Zbog toga, u implementaciji ovog dijela algoritma provjeravamo oslabljene uvjete:

$$\frac{|\lambda_{\min}^{\text{aps}}(B_p)|}{|\lambda_{\max}^{\text{aps}}(B_p)|} < \texttt{tol},$$

za skoru neinvertibilnost matrice B_p (ovdje $\lambda_{\min}^{\text{aps}}(B_p)$ ($\lambda_{\max}^{\text{aps}}(B_p)$) označava manju (veću) po modulu svojstvenu vrijednost matrice B_p) i

$$\max\{\, a, b, c \,\} < \texttt{tol}$$

za skoru singularnost para (A_p, B_p), gdje su a, b, c iz (2.14) dok je `tol` neka dana tolerancija. Kako singularni matrični parovi jako malim perturbacijama postaju regularni parovi i to s proizvoljnim svojstvenim vrijednostima, algoritam bi trebao vratiti upozorenje da je našao jedan singularan komprimirani par i da je konačan zaključak o indefinitnosti zadanog para upitan.

Ukoliko je B_p nul-matrica, a A_p pozitivno (negativno) definitna, onda je par (A_p, B_p) pozitivno (negativno) definitan par s definitnim intervalom koji je jednak $\mathbb{R}$. Ukoliko je B_p nul-matrica, a A_p neinvertibilna ili A_p invertibilna indefinitna slijedi da je par (A_p, B_p) indefinitan (uvjet postojanja $\lambda_0^p \in \mathbb{R}$ takvog da je $A_p - \lambda_0^p O \succ (\prec) 0$ moguće je samo kada je A_p definitna).

Konačno promotrimo slučaj kada je B_p invertibilna matrica (i nije blizu singularnoj), tj. $a \neq 0$ ($\frac{|\lambda_{\min}^{\text{aps}}(B_p)|}{|\lambda_{\max}^{\text{aps}}(B_p)|} \geq \texttt{tol}$). U tom slučaju par (A_p, B_p) ima dvije različite svojstvene vrijednosti (realne ili kompleksno-konjugiran par) ili jednu realnu dvostruku svojstvenu vrijednost koje su dane s

$$\lambda_{1,2}^p = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

U slučaju kompleksnih svojstvenih vrijednosti par (A_p, B_p) je indefinitan. U slučaju dvije realne različite svojstvene vrijednosti par (A_p, B_p) je sigurno definitan ako je B_p definitna matrica te imamo sljedeće mogućnosti za B_p-predznake svojstvenih vrijednosti:

$$+\,+; \quad -\,,-$$

($B_p \succ 0$; $B_p \prec 0$). Nadalje, u slučaju da je B_p indefinitna i da imamo dvije realne različite svojstvene vrijednosti para (A_p, B_p), imamo sljedeće mogućnosti za B_p-predznake svojstvenih vrijednosti:

$$-,+; \quad +\,-\,.$$

Prema Teoremu 1.9 pod 3. u tom je slučaju par (A_p, B_p) definitan. Konačno, u slučaju jedne realne dvostruke svojstvene vrijednosti par (A_p, B_p) je definitan ako je B_p definitna, a indefinitan ako je B_p indefinitna (ta svojstvena vrijednost je mješovitog tipa).

Primjer 2.10 Promotrimo simetrični matrični par (A_p, B_p) dan s:

$$A_p = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad B_p = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Matrica A_p je invertibilna pa je $c = \det A_p \neq 0$, dok je matrica B_p pozitivno semidefinitna pa je $a = \det B_p = 0$. Lako se provjeri da je $b = 0$ pa iz (2.14) slijedi da par (A_p, B_p) ima dvije beskonačne svojstvene vrijednosti, pa je indefinitan par. $\diamond$

Vratimo se sada ispitivanju pozitivne definitnosti zadanog para (A, B). Ako neki komprimirani 2×2 par (A_p, B_p) nije definitan, onda ni par (A, B) nije pozitivno definitan. Za nastavak ispitivanja nam je potrebna sljedeća lema.

Lema 2.11 Nužan uvjet za pozitivnu definitnost para (A, B) s indefinitnom B je sljedeći: svaki komprimirani 2×2 par (A_p, B_p) iz (2.13) mora biti definitan i sve B_p-pozitivne svojstvene vrijednosti moraju biti veće od svih B_p-negativnih svojstvenih vrijednosti.

Ako je uvjet Leme 2.11 prekršen za neki komprimirani par, onda par (A, B) nije pozitivno definitan. Ako je nužan uvjet za pozitivnu definitnost para ispunjen (time se automatski isključuje negativna definitnost), zaključujemo da postoji mogućnost da je par pozitivno definitan i dobivamo interval unutar kojeg se nalazi njegov definitan interval, ukoliko se zaista radi o pozitivno definitnom paru. Taj interval dobijemo na sljedeći način:

$$\langle \max \theta^-, \min \theta^+ \rangle, \tag{2.15}$$

gdje θ^+ (θ^-) ide po skupu svih B_p-pozitivnih (B_p-negativnih) svojstvenih vrijednosti svih definitnih komprimiranih 2×2 parova (A_p, B_p) iz (2.13). Ako je duljina intervala u (2.15) manja ili jednaka od neke zadane tolerancije `tol` zaključujemo da je par (A, B) blizu pozitivno semidefinitnog para. Interval (2.15) je formiran u slučaju da je B takva da ima barem jednu glavnu 2×2 podmatricu B_p s barem jednom B_p-pozitivnom svojstvenom vrijednosti i da ima barem jednu glavnu 2×2 podmatricu B_p s barem jednom B_p-negativnom svojstvenom vrijednosti.

Gornja rasprava vodi nas do Algoritma 2.3. Skup $\{\theta^+\}$ ($\{\theta^-\}$) iz Linije 9 (10) Algoritma 2.3, ukoliko je neprazan, predstavlja skup svih B_p-pozitivnih (B_p-negativnih) svojstvenih vrijednosti svih do sada izračunatih definitnih komprimiranih parova (A_p, B_p) iz (2.13). U implementaciji Algoritma 2.3 broj $\mathcal{I}_d$ ($\mathcal{I}_\ell$) iz Linije 9 (10) dobivamo tako što uspoređujemo zadnji izračunati broj $\mathcal{I}_d$ ($\mathcal{I}_\ell$) s trenutnom manjom (većom) B_p-pozitivnom (B_p-negativnom) svojstvenom vrijednosti (ne pamtimo sve do sada izračunate svojstvene vrijednosti definitnih komprimiranih parova). Ukoliko niti na jednom komprimiranom paru (A_p, B_p) nije otkrivena indefinitnost zadanog matričnog para (A, B), a matrica B je takva da ima sve pozitivno (semi)definitne ili sve negativno (semi)definitne glavne 2×2 podmatrice, onda ne možemo formirati interval (2.15). U tom slučaju algoritam na izlazu može dati interval

$$\langle -\infty, \min \theta^+ \rangle \ \text{ odnosno } \ \langle \max \theta^-, +\infty \rangle.$$

Ritzovi vektori (koje možemo računati tokom izvršavanja Algoritma 2.3 koji pripadaju Ritzovim vrijednostima koje čine rubove intervala (2.15) mogu poslužiti kao stupci matrice $X^{(0)}$ početnih aproksimacija u algoritmu ispitivanja potprostora izvedenom u Odjeljku 2.2.2.

Analognu raspravu kao gore možemo provesti i za ispitivanje negativne definitnosti zadanog hermitskog matričnog para što dovodi do Algoritma 2.4.

Napomena 2.12 Algoritme 2.3 i 2.4 možemo ujediniti u jedan algoritam ispitivanja glavnih podmatrica reda 2, kako smo i implementirali u Matlab-u. Ukoliko se tijekom

Algoritam 2.3 Algoritam za ispitivanje pozitivne definitnosti hermitskog matričnog para pomoću glavnih podmatrica reda 2

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$: koeficijenti hermitskog matričnog para (A, B); tolerancija `tol`;
Izlaz: Interval $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{I}_d$ i svojstvo para (A, B) : (samo jedno od sljedećeg) pozitivno definitan, nije pozitivno definitan, možda pozitivno definitan, blizu pozitivno semidefinitnog , indefinitan

$I_d := +\infty$, $I_\ell := -\infty$
Iteracija:
za $i = 1, \ldots, n$ **čini**
    za $j = i + 1, \ldots, n$ **čini**
        Formirati $A_p = \begin{bmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ \overline{a_{ij}} & a_{jj} \end{bmatrix}, \quad B_p = \begin{bmatrix} b_{ii} & b_{ij} \\ \overline{b_{ij}} & b_{jj} \end{bmatrix}$,
        ako (A_p, B_p) indefinitan **tada**
            kraj ((A, B) je indefinitan).
        inače
                definirati $\mathcal{I}_d := \min\{\, \theta^+ \,\}$ ukoliko je $\{\, \theta^+ \,\} \neq \emptyset$;
                definirati $\mathcal{I}_\ell := \max\{\, \theta^- \,\}$ ukoliko je $\{\, \theta^- \,\} \neq \emptyset$;
            Ako je $\mathcal{I}_\ell \geq \mathcal{I}_d$, kraj ($(A, B)$ nije pozitivno definitan).
            Ako je $\mathcal{I}_\ell < \mathcal{I}_d$ i $\mathcal{I}_d - \mathcal{I}_\ell <$ `tol` kraj ((A, B) je blizu pozitivno semidefinitnog).
        kraj ako
    kraj za
kraj za

Algoritam 2.4 Algoritam za ispitivanje negativne definitnosti hermitskog matričnog para pomoću glavnih podmatrica reda 2

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$: koeficijenti hermitskog matričnog para (A, B); tolerancija `tol`;
Izlaz: Interval $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{I}_d$ i svojstvo para (A, B) : (samo jedno od sljedećeg) negativno definitan, nije negativno definitan, možda negativno definitan, blizu negativno semidefinitnog, indefinitan

$I_d := +\infty$, $I_\ell := -\infty$
Iteracija:
za $i = 1, \ldots, n$ **čini**
    za $j = i + 1, \ldots, n$ **čini**
        Formirati $A_p = \begin{bmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ \overline{a_{ij}} & a_{jj} \end{bmatrix}, \quad B_p = \begin{bmatrix} b_{ii} & b_{ij} \\ \overline{b_{ij}} & b_{jj} \end{bmatrix}$,
        ako (A_p, B_p) indefinitan **tada**
            kraj ((A, B) je indefinitan).
        inače
                definirati $\mathcal{I}_d := \min\{\, \theta^- \,\}$ ukoliko je $\{\, \theta^- \,\} \neq \emptyset$;
                definirati $\mathcal{I}_\ell := \max\{\, \theta^+ \,\}$ ukoliko je $\{\, \theta^+ \,\} \neq \emptyset$;
            Ako je $\mathcal{I}_\ell \geq \mathcal{I}_d$, kraj ($(A, B)$ nije negativno definitan).
            Ako je $\mathcal{I}_\ell < \mathcal{I}_d$ i $\mathcal{I}_d - \mathcal{I}_\ell <$ `tol` kraj ((A, B) je blizu negativno semidefinitnog).
        kraj ako
    kraj za
kraj za

izvršavanja tog ujedinjenog algoritma ustanovi da su prekršena oba nužna uvjeta i za pozitivnu i za negativnu definitnost, zaključujemo da zadani matrični par nije definitan i algoritam staje. Kada algoritam ispitivanja svih glavnih podmatrica reda 2 završi, korisnik dobiva jedan od osam odgovora navedenih u Napomeni 2.8. Numerički eksperimenti Potpoglavlja 2.3 pokazuju da ovi algoritmi, u slučaju definitnosti danog matričnog para, mogu jako dobro aproksimirati definitni interval.

Eksperiment 2.13 Algoritam ispitivanja svih 2×2 glavnih podmatrica iz Napomene 2.12 testirat ćemo na matricama iz Eksperimenta 2.9. Neka su matrice $A_s = B_s$ realne simetrične indefinitne Hankelove matrice zadane Matlab-ovom naredbom

```
As=gallery('ris',n-2*r-1).
```

Za $n = 100$ i $r = 25$ naš algoritam na drugom paru 2×2 podmatrica otkriva da par (A, B) nije negativno definitan, a na trećem paru 2×2 podmatrica otkriva da je par indefinitan. Sjetimo se da su lučnom algoritmu bile potrebne četiri iteracije (sve su prekinute s oko 30 koraka u pokušaju provođenja faktorizacije Choleskog). Ukoliko definiramo matrice $A_s = B_s$ u Matlab-ovoj notaciji s

```
As=-diag(1:n-2*r-1)
```

algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata dao je odgovor da je par (A, B) možda definitan, dok algoritam ispitivanja 2×2 glavnih podmatrica otkriva odmah na prvom paru 2×2 podmatrica da par (A, B) nije negativno definitan, no tek na 2935. (od ukupno 4950) paru podmatrica otkriva da par (A, B) nije ni pozitivno definitan (prvi par 2×2 podmatrica bio je pozitivno definitan, a ostalih 2934 bilo je s pozitivno definitnom matricom B_p), te se time zaključuje indefinitnost para (A, B). U ovom slučaju je algoritam ispitivanja 2×2 podmatrica korisniji od algoritma ispitivanja dijagonalnih elemenata, ali je sporiji od lučnog algoritma (kojemu su trebale četiri iteracije sa sljedećim koracima u kojima je prekinuta faktorizacija Choleskog, s potpunim pivotiranjem, određene 100×100 matrice: $72, 69, 68, 71$).

2.2.2 Algoritam ispitivanja potprostora

U ovom odjeljku generaliziramo Kellerinu metodu koordinatne relaksacije za ispitivanje definitnosti zadanog hermitskog matričnog para tako što povećavamo dimenziju test-potprostora, a za provjeru definitnosti komprimiranog para na tom test-potprostoru koristimo Veselićev J-Jacobijev algoritam. Za provjeru pozitivne definitnosti zadanog para ne moramo nužno odrediti definitni interval, nego u našoj iterativnoj metodi uzimajući sredinu μ trenutnog radnog intervala, tj. intervala koji je nastao presjekom svih do sada izračunatih definitnih intervala komprimiranih parova, provjeravamo uvjet $A - \mu B \succ 0$.

Ako uvjet definitnosti vrijedi, par (A, B) je pozitivno definitan i μ je neki definitni pomak te zaustavljamo metodu, ako nije, nastavljamo dalje s novim test-potprostorom. Ako je par (A, B) pozitivno definitan, nastavljajući s metodom dobivamo aproksimacije svojstvenih vrijednosti oko definitnog intervala i pripadnih svojstvenih vektora kako je opisano u Poglavlju 3.

Prisjetimo se Lema 1.27 i 1.28. U prethodnom je odjeljku matrica U kao stupce sadržavala stupce jedinične matrice, tj. provjeravala se definitnost para glavnih podmatrica. Ti algoritmi, nažalost, ne moraju dati konačan odgovor: je li zadani matrični par definitan ili nije. U ovom ćemo odjeljku dati napredniji izbor stupaca matrice U tako da će pripadni iterativni postupak, u konačno mnogo koraka, dati konačan odgovor: dani matrični par je definitan ili je dani matrični par indefinitan.

Neka je (A, B) hermitski matrični par reda n takav da B ima inerciju $\mathsf{In}(B) = (n_+, n_-, n_0) \geq (1, 1, 0)$ gdje se nejednakost podrazumijeva po elementima. Neka je $X^{(0)} \in \mathbb{C}^{n\times 2}$ proizvoljna početna matrica punog ranga, takva da $(1, 1, 0) = \mathsf{In}\Big((X^{(0)})^H B X^{(0)}\Big)$, tj. jedan stupac matrice $X^{(0)}$ je B-negativan dok je drugi B-pozitivan. Promotrimo komprimirani par $(A_p, B_p) := (X^{(0)H} A X^{(0)}, X^{(0)H} B X^{(0)})$ reda 2. Ukoliko taj komprimirani par nije definitan, onda prema Lemi 1.27 nije definitan ni zadani par (A, B). No, ukoliko je taj komprimirani par definitan, on je ili pozitivno ili negativno definitan (jer je matrica B_p indefinitna). Nadalje, neka su $y_l, y_d \in \mathbb{C}^2$ svojstveni vektori koji odgovaraju svojstvenim vrijednostima θ_l, θ_d, tim redom, koje čine rubove definitnog intervala (θ_l, θ_d) definitnog komprimiranog para (A_p, B_p). Neka je $Y = [y_l, y_d]$. Tada je $X = X^{(0)} Y \in \mathbb{C}^{n\times 2}$ matrica Ritzovih vektora, koja je punog ranga, te neka je $\Theta = \operatorname{diag}(\theta_l, \theta_d)$ dijagonalna matrica pripadnih Ritzovih vrijednosti para (A, B). Izračunajmo sredinu θ_0 intervala (θ_l, θ_d). Ukoliko je par (A_p, B_p) pozitivno (negativno) definitan, provjeravamo je li matrica $A - \theta_0 B$ pozitivno (negativno) definitna. Ukoliko jest, to znači da je i zadani par (A, B) pozitivno (negativno) definitan, θ_0 mu je neki definitni pomak i završili smo s ispitivanjem. Ukoliko to nije slučaj, računamo matricu reziduala (v. Definiciju 1.29) $R = AX - BX\Theta$. Neka je [1]

$$U = [X, R] \in \mathbb{C}^{n\times 4}.$$

Sada promotrimo novi komprimirani par $(U^H A U, U^H B U)$ reda 4. Ukoliko taj komprimirani par nije definitan, onda prema Lemi 1.27 nije definitan ni zadani par (A, B). No, ukoliko je taj komprimirani par definitan, on je ili pozitivno ili negativno definitan (matrica $U^H B U$ je indefinitna jer $\mathsf{In}(U^H B U) \geq (1, 1, 0)$ prema Lemi 1.25). Ukoliko se njegova definitnost razlikuje od definitnosti prvog komprimiranog para (A_p, B_p), onda prema Lemi 1.28, zadani par (A, B) nije definitan. Ukoliko to nije slučaj, onda je definitni interval drugog komprimiranog para sadržan u definitnom intervalu prvog komprimiranog para (v. Propoziciju 2.17).

[1] Koristimo samo matrice U punog ranga stupaca, što osiguravamo postupkom ortogonalizacije.

Umjesto proizvoljne početne matrice ranga 2, možemo koristiti i matricu $X^{(0)} \in \mathbb{C}^{n\times k}$, $k \geq 2$ punog ranga takvu da $X^{(0)}$ ima barem jedan B-negativan i barem jedan B-pozitivan stupac. Prvi komprimirani par $(A_p, B_p) := (X^{(0)H} A X^{(0)}, X^{(0)H} B X^{(0)})$ tada je reda k, a komprimirani par $(U^H AU, U^H BU)$, gdje je $U = [X, R]$ je reda $2k$ (ovdje je $Y \in \mathbb{C}^{k\times k}$ matrica svojstvenih vektora para (A_p, B_p), $\Theta \in \mathbb{R}^{k\times k}$ dijagonalna matrica svojstvenih vrijednosti para (A_p, B_p), $X = X^{(0)} Y \in \mathbb{C}^{n\times k}$ matrica Ritzovih vektora, $AX - BX\Theta = R \in \mathbb{C}^{n\times k}$ matrica reziduala).
Gornja rasprava vodi nas do Algoritma 2.5, iterativnog postupka za ispitivanje definitnosti danog hermitskog matričnog para (A, B), s indefinitnom matricom B, koja može i ne mora biti invertibilna. Algoritam smo nazvali *algoritam ispitivanja potprostora* jer testirajući definitnost malih komprimiranih parova $(U^H AU, U^H BU)$, koji nastaju zadavanjem nekog test-potprostora $\mathcal{U} = \operatorname{span} U$, ispitujemo definitnost zadanog velikog matričnog para (A, B). U tom algoritmu, linija 12 glasi:

$$W^{(i)} \leftarrow R^{(i)}.$$

Prije nego što opišemo neke implementacijske detalje Algoritma 2.5, malo se detaljnije podsjetimo hermitske indefinitne dekompozicije.

Napomena 2.14 Hermitska indefinitna dekompozicija je faktorizacija hermitske $n \times n$ matrice H oblika

$$PHP^T = LDL^H, \tag{2.16}$$

gdje je P permutacijska matrica, L je donje trokutasta matrica, a $D = D^H$ je blok-dijagonalna matrica s 1×1 ili 2×2 dijagonalnim blokovima. Ukoliko je H zaista indefinitna, onda se pivotnim strategijama postiže da su 2×2 dijagonalni blokovi od D indefinitni, pa se prema Sylvesterovom teoremu jednostavno može očitati inercija matrice H iz dijagonalnih blokova matrice D. Dodatna dijagonalizacija dijagonalnih blokova u D i pripadno skaliranje stupaca matrice L vodi do faktorizacije oblika (v. [75, Odjeljak 2])

$$PHP^T = GJG^H, \; J = \operatorname{diag}(j_{11}, \dots, j_{nn}). \tag{2.17}$$

Ako je H invertibilna, onda je G donje blok-trokutasta s 1×1 ili 2×2 dijagonalnim blokovima, a prema Sylvesterovom teoremu, J sadrži inerciju od H, tj. $j_{ii} \in \{1, -1\}$ za $i = 1, \dots, n$. Ako je H neinvertibilna ranga $m < n$ tada je G donje blok-trapezoidna $n \times m$ matrica punog ranga stupaca, a J je $m \times m$ matrica koja sadrži predznake nenul svojstvenih vrijednosti matrice H. Hermitska indefinitna dekompozicija (2.16) može se dobiti varijantama Bunch-Parlettove faktorizacije [2, 8, 9, 10, 11, 14] koje su povratno stabilne, a čiji je numerički trošak za gusto popunjenu matricu $O(n^3/3)$. Pivotne strategije se tvore tako da ograniče rast elemenata u faktoru L. Ukoliko je hermitska matrica H vrpčasta, tj. $h_{ij} = 0$ za $|i - j| > k$, ne želimo koristiti permutaciju u (2.16) jer će ona

Algoritam 2.5 Algoritam ispitivanja potprostora za ispitivanje definitnosti hermitskog matričnog para

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: koeficijenti hermitskog matričnog para (A, B) s indefinitnom B; `tol` zadana tolerancija;
$X^{(0)} \in \mathbb{C}^{n\times k}$: početna matrica td $(1, 1, 0) \leq \mathsf{In}\Big((X^{(0)})^H BX^{(0)}\Big)$ gdje se nejednakost podrazumijeva po elementima.

Izlaz: par (A, B) definitan ili indefinitan, i u slučaju da je definitan algoritam vraća broj λ_0 td $(A - \lambda_0 B)$ definitna.

1: **Inicijalizacija**:
2: Ako je $x^H Ax = 0$ i $x^H Bx = 0$ za neki stupac x matrice $X^{(0)}$, kraj ((A, B) je indefinitan).
3: B-ortonormirati $X^{(0)}$.
4: Ispitati je li komprimirani par $(X^{(0)H}AX^{(0)}, X^{(0)H}BX^{(0)})$ definitan; ako nije definitan, kraj; ako je definitan (zapamtiti je li pozitivno ili negativno definitan) vrati matricu svojstvenih vektora $Y^{(0)}$, dijagonalnu matricu svojstvenih vrijednosti $\Theta^{(0)}$, definitni interval $\mathcal{I}^{(0)} = (E_l^{(0)}, E_d^{(0)})$ te njegovu sredinu $\theta_0^{(0)}$.
5: Neka je $X^{(0)} \leftarrow X^{(0)}Y^{(0)}$ matrica Ritzovih vektora.
6: Ako je $x^H Ax = 0$ i $x^H Bx = 0$ za neki stupac x matrice $X^{(0)}$, kraj ((A, B) je indefinitan).
7: **Iteracija**:
8: **za** $i = 0, 1, 2, \ldots$ **čini**
9: Izračunati rezidual $R^{(i)} = AX^{(i)} - BX^{(i)}\Theta^{(i)}$.
10: Ako je $r^H Ar = 0$ i $r^H Br = 0$ za neki stupac $r \neq 0$ matrice $R^{(i)}$, kraj ((A, B) je indefinitan).
11: Ako je prvi komprimirani par u Liniji 4 pozitivno (negativno) definitan, provjeriti je li $A - \theta_0^{(i)}B \succ 0$ ($\prec 0$). Ako je, kraj (par je definitan).
12: Izračunaj (prekondicionirani) rezidual $W^{(i)} \leftarrow (T^{(i)}\cdot)R^{(i)}$.
13: Definiraj potprostor $U^{(i)} \leftarrow [X^{(i)}, W^{(i)}]$.
14: B-ortonormirati $U^{(i)}$.
15: Ispitati je li komprimirani par $(U^{(i)H}AU^{(i)}, U^{(i)H}BU^{(i)})$ definitan; ako nije definitan, kraj ((A, B) je indefinitan); ako je definitan, ali njegova definitnost nije kao definitnost početnog komprimiranog para u Liniji 4, kraj ((A, B) je indefinitan). Ako je definitan, vrati matricu svojstvenih vektora $Y^{(i+1)}$, dijagonalnu matricu svojstvenih vrijednosti $\Theta^{(i+1)}$, definitni interval $\mathcal{I}^{(i+1)} = (E_l^{(i+1)}, E_d^{(i+1)})$ te njegovu sredinu $\theta_0^{(i+1)}$. Ako je $E_d^{(i+1)} - E_l^{(i+1)} <$ `tol`, kraj ((A, B) je blizu indefinitnog para).
16: Neka je $X^{(i+1)} \leftarrow U^{(i)}Y^{(i+1)}$ matrica Ritzovih vektora.
17: Ako je $x^H Ax = 0$ i $x^H Bx = 0$ za neki stupac x matrice $X^{(i+1)}$, kraj ((A, B) je indefinitan).
18: **kraj za**
19: $\lambda_0 = \theta_0^{(i)}$.

narušiti njenu strukturu i zahtjevat će dodatnu memoriju za pohranu elemenata faktora. Npr. hermitska tridijagonalna H (H je tridijagonalna ako je $h_{ij} = 0$ za $|i-j| > 1$) zahtjeva dva n-vektora za pohranu, njen donje trokutasti faktor L (uz dijagonalu je još samo prva donja subdijagonala netrivijalna) i hermitska blok-dijagonalna D također zatjevaju svaki po dva n-vektora za pohranu. Za vrpčaste matrice postoje pivotne strategije koje koriste specijalno pivotiranje koje čuva strukturu početne vrpčaste matrice tijekom cijelog procesa. Tako su za simetrične tridijagonalne matrice razvijene sljedeće pivotne strategije: Bunch 1974. [9], Bunch i Kaufman 1977. [11, Odjeljak 4.2], Bunch i Marcia 2005. [12], Bunch i Marcia 2006. [13]. Za opće simetrične vrpčaste matrice H sa širinom vrpce k, tj. $h_{ij} = 0$ za $|i-j| > k$, Kaufman je 2007. u radu [35] izvela algoritam faktorizacije koji čuva strukturu tokom procesa (kada koristi permutiranje radi stabilnosti, odmah se vrše transformacije koje radnu matricu vraćaju u početnu strukturu). Njen algoritam zahtjeva $O(nk^2)$ računskih operacija za dekompoziciju i $O(kn)$ memorijskog prostora.
Kada god budemo spominjali simetričnu indefinitnu dekompoziciju oblika (2.16) ili (2.17) neke vrpčaste matrice, podrazumijevat ćemo da je ona nastala nekom pivotnom strategijom (kako smo naveli iznad) koja omogućava čuvanje strukture tijekom procesa te koja ima linearan numerički trošak. $\diamond$

Navodimo napomene oko same implementacije Algoritma 2.5 kako slijedi:

Ulaz Korisnik treba upotrijebiti valjanu početnu matricu $X^{(0)}$ u smislu da

$$\mathsf{In}\Big((X^{(0)})^H B X^{(0)}\Big) = (k_+, k_-, k_0) \geq (1, 1, 0)$$

vrijedi (nejednakost se podrazumijeva po elementima). Uočimo da nejednakost $k_\pm \leq p_\pm$ za $\mathsf{In}\Big((U^{(i)})^H B U^{(i)}\Big) = (p_+, p_-, p_0)$ tada vrijedi za sve iteracijske matrice $U^{(i)}$, $i = 1, 2, 3, \ldots$ što slijedi induktivno iz Leme 1.25. U mnogim primjenama je izabiranje prikladne početne matrice izravno, jer matrica B često ima određenu strukturu, npr. kada je B dijagonalna.

Linija 3 i 14 Općenito, korištenje ortonormirane baze vodi do poboljšanja numeričke stabilnosti određenih algoritama. Mi ćemo ovdje koristiti ortonormiranje u indefinitnom B-skalarnom produktu. Jedan od razloga je što B-ortonormirana baza vodi do jednostavnijeg računa u Linijama 4 i 15. Također, B-ortonormirani vektori pojavljuju se u nejednakosti (1.18), koja je teorijska podloga za algoritme računanja svojstvenih vrijednosti izvedenih u Poglavlju 3. Stoga primijenjujemo Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije (u indefinitnom B-skalarnom produktu) na stupce trenutne matrice baze $U^{(i)} \equiv U = [u_1, u_2, \ldots, u_p]$. Prvi korak te procedure je u normiranju u_1: $u_1 \leftarrow u_1 \Big/ |u_1^H B u_1|^{1/2}$. Pretpostavimo sada da je prvih $\ell - 1$

stupaca $U_{\ell-1} = [u_1, u_2, \ldots, u_{\ell-1}]$ već B-ortonormirano. Tada ℓ-ti korak ima oblik[2]

$$\begin{aligned} u_\ell &\leftarrow u_\ell - U_{\ell-1} J U_{\ell-1}^H B u_\ell, \\ u_\ell &\leftarrow u_\ell \Big/ |u_\ell^H B u_\ell|^{1/2}, \end{aligned}$$

gdje, po konstrukciji, $J := U_{\ell-1}^H B U_{\ell-1} = \operatorname{diag}\{\pm 1\}$ je dijagonalna matrica s ± 1 na dijagonali. Kako je raspravljano u [3, Odjeljak 8], pažljiva implementacija ove sheme treba koristiti reortogonalizaciju ili modificirani Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije da se izbjegnu nestabilnosti.

Također, postoji dodatna poteškoća tijekom Gram-Schmidtovog postupka ortogonalizacije, a vezana je za moguće pojavljivanje B-neutralnih vektora u_ℓ čak i kada je $U^H B U$ invertibilna. To se može izbjeći predprocesom na matrici U tako da je $|u_\ell^H B u_\ell|$ monotono padajuće. Jedan način da se to postigne jest da se izvede faktorizacija oblika

$$P^H U^H B U P = L D L^H,$$

gdje je P permutacijska matrica, a D je dijagonalna matrica s dijagonalnim elementima opadajućeg modula. Vidi npr. [30] za opis algoritma. Dijagonalni elementi jednaki 0 odgovaraju B-neutralnim vektorima, koji mogu i trebaju biti izbačeni iz bazne matrice. Time se dimenzija pripadnog potprostora smanjuje. U egzaktnoj aritmetici, stupci od $U \leftarrow U P L^{-H}$ su već B-ortogonalni i još ih je potrebno samo skalirati da budu i B-normirani. Međutim uočili smo da je numerički sigurnije izvesti Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije na tako dobivenoj matrici U.

Linije 4 i 15 Označimo $U^{(i)} \equiv U$. Kako je komprimirani par $(A_p, B_p) \equiv (U^H A U, U^H B U)$ jako malog reda $p = 2k$, a $k \in \{2, 4, 6\}$ obično, to za provjeru njegove definitnosti, uz pretpostavku da je B_p invertibilna, možemo koristiti npr. Veselićev indefinitni J-Jacobijev algoritam [82] primijenjen na ekvivalentnom paru $(G^{-1} A_p G^{-H}, J)$ gdje je $G J G^H$ simetrična indefinitna dekompozicija matrice B_p takva da $J = \operatorname{diag}(I_{p_+}, -I_{p_-})$, $p_+ := \mathsf{In}_+(B_p)$, $p_- := \mathsf{In}_-(B_p)$. Sjetimo se, nakon postupka B-ortonormalizacije, vraćena bazna matrica U ima B-ortonormirane stupce, tj. barem teorijski, vrijedi $B_p = \operatorname{diag}\{\pm 1\}$ pa je matrica B_p invertibilna. Numerički, matrica B_p može imati jako sitne vandijagonalne elemente pa zbog toga ipak provodimo spomenutu simetričnu indefinitnu dekompoziciju (obično, takva G će biti određena perturbacija permutacijske matrice: u svakom retku/stupcu ima po jednu jedinicu, a ostali elementi su jako sitni ili jednaki 0). Ukoliko je $(G^{-1} A_p G^{-H}, J)$ definitan par, algoritam iz [82] vraća sve njegove svojstvene vrijednosti $\theta_j^{\pm}$ i pripadne svojstvene vektore $z_j^{\pm}$. Neka su, u pozitivno definitnom slučaju, sve svojstvene vrijednosti para

[2]Neka je $\mathcal{U}$ potprostor s B-ortonormiranom baznom matricom $U = [u_1, \ldots, u_r]$. Tada je $U U^H B U U^H B$ B-ortogonalni projektor na $\mathcal{U}$, pa je vektor $x - U U^H B U U^H B x$ B-ortogonalan na $\mathcal{U}$.

$(G^{-1}A_pG^{-H}, J)$ dane s

$$\theta^-_{p_-} \leq \cdots \leq \theta^-_1 < \theta^+_1 \leq \cdots \leq \theta^+_{p_+},$$

J-predznaci svojstvenih vrijednosti su određeni inercijom matrice J. Neka je

$$\Theta = \mathrm{diag}\left(\theta^-_{k_-}, \ldots, \theta^-_1, \theta^+_1, \ldots, \theta^+_{k_+}\right),$$

dijagonalna matrica svojstvenih vrijednosti para (A_p, B_p) oko njegovog definitnog intervala, a

$$\begin{aligned} Y &= G^{-H}\left[z^-_{k_-}, \ldots, z^-_1, z^+_1, \ldots, z^+_{k_+}\right] \\ &= \left[y^-_{k_-}, \ldots, y^-_1, y^+_1, \ldots, y^+_{k_+}\right] \end{aligned}$$

matrica pripadnih svojstvenih vektora (svojstveni vektor $y^\pm_j$ je pridružen svojstvenoj vrijednosti $\theta^\pm_j$). Matrica Ritzovih vektora para (A, B) je tada dana s $X = UY$, tj. Ritzovi parovi su dani s $(\theta^\pm_j, Uy^\pm_j)$ za $1 \leq j \leq k_\pm$. Ako je $\theta^+_1 - \theta^-_1 < \texttt{tol}$, gdje je `tol` neka zadana tolerancija, algoritam staje s naznakom da je (A, B) blizu indefinitnog para.

Linije 6 i 17 Ukoliko je $x^HAx = 0$ i $x^HBx = 0$ za neki nenul vektor x tada je Crawfordov broj para (A, B) jednak 0 i (A, B) je indefinitan matrični par. U implementaciji koristimo oslabljeni kriterij:

$$\frac{x^HAx}{\|A\|_\infty} \leq \epsilon \ \text{ i } \ \frac{x^HBx}{\|B\|_\infty} \leq \epsilon,$$

gdje je ϵ jedinična greška zaokruživanja, s naznakom da je zadani par blizu indefinitnog.

Linija 10 Ukoliko je slučajno neka Ritzova vrijednost $\theta^{(i)}_j$ ujedno i neka svojstvena vrijednost para (A, B) tada će odgovarajući stupac matrice reziduala $R^{(i)}$ biti jednak nul-stupcu, pa njega ne smijemo koristiti u provjeri uvjeta $r^HAr = 0$ i $r^HBr = 0$. Također, ukoliko je norma nekog stupca r jako mala, možemo dobiti, u aritmetici konačne preciznosti, pogrešan zaključak da je par (A, B) indefinitan; stoga u implementaciji koristimo oslabljeni kriterij:

$$\frac{r^HAr}{\|A\|_\infty} \leq \epsilon \ \text{ i } \ \frac{r^HBr}{\|B\|_\infty} \leq \epsilon$$

samo za one stupce r koji imaju normu veću od neke zadane tolerancije, a ϵ je jedinična greška zaokruživanja.

Linija 11 Provjeru je li matrica $A-\theta_0^{(i)}B$ pozitivno definitna vršimo pokušajem izvršenja faktorizacije Choleskog. Kod manjih gusto popunjenih matrica možemo koristiti faktorizaciju Choleskog s pivotiranjem, a kod rijetko popunjenih i velikih koristimo faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja. Ukoliko je faktorizacija Choleskog uspješno izvršena, što zahtjeva $n^3/3$ računskih operacija za gustu matricu reda n, gotovi smo s ispitivanjem; no ukoliko faktorizacija Choleskog nije izvršena ona može biti (što naravno nije uvijek slučaj) prekinuta puno prije izvršenja n koraka (kao što ćemo vidjeti u numeričkim eksperimentima u Potpoglavlju 2.3). Nije nužno pokušavati izvršiti faktorizaciju Choleskog u svakoj iteraciji Algoritma 2.5; to se može učiniti nakon određene konvergencije intervala $\mathcal{I}^{(i)}$ (usp. s Napomenom 2.15 i 2.16).

Kao što je vidljivo na Slici 2.2 ili 2.3 (gornji lijevi graf), kraj Algoritma 2.5 s $U=[X,R]$ može biti postignut tek nakon mnogo iteracija ili ne postignut nakon danog maksimalnog broja iteracija, tim redom. Zbog toga uvodimo određeno ubrzanje: umjesto matrice $U^{(i)}=[X^{(i)},R^{(i)}]$ koristimo matricu

$$U^{(i)}=[X^{(i)},T^{(i)}\cdot R^{(i)}],$$

gdje je $T^{(i)}\cdot R^{(i)}$ *matrica prekondicioniranog reziduala*, invertibilna matrica $T^{(i)}=(A-\theta_0^{(i)}B)^{-1}$ *matrica prekondicioniranja*, a $\theta_0^{(i)}$ sredina definitnog intervala prethodnog definitnog komprimiranog para. To nas dovodi do Algoritma 2.5 u kojem linija 12 glasi:

$$W^{(i)}\leftarrow T^{(i)}\cdot R^{(i)}.$$

Ukoliko Algoritam 2.5 ne završi Linijom 11, i ukoliko $\theta_0^{(i)}$ nije neka svojstvena vrijednost matrice $A-\theta_0^{(i)}B$, tada je matrica $A-\theta_0^{(i)}B$ invertibilna i indefinitna (v. Teorem 1.9 pod 4.) pa stupce $w_j^{(i)}$ matrice $W^{(i)}=T^{(i)}\cdot R^{(i)}$ dobivamo rješavajući linearne sustave

$$(A-\theta_0^{(i)}B)w_j^{(i)}=r_j^{(i)},\ j=1,\ldots,k,\ \ k=k_++k_- \tag{2.18}$$

gdje su $r_j^{(i)}$ stupci matrice $R^{(i)}$. Ukoliko koristimo direktne metode za rješavanje linearnih sustava, koristimo faktorizaciju matrice linearnih sustava (2.18). Kako je potrebno riješiti više linearnih sustava s istom matricom, to ćemo jednom izračunati faktorizaciju matrice i njene faktore koristiti za svaki pojedini linearni sustav u (2.18). Ako koristimo faktorizaciju LDL^H iz (2.16) invertibilne matrice $A-\theta_0^{(i)}B$, tada stupac $w_j^{(i)}$ matrice $W^{(i)}$ dobivamo rješavajući tri linearna sustava:

$$\underbrace{Ls=r_j^{(i)}}_{\text{supstitucije unaprijed}},\quad Dt=s,\quad \underbrace{L^Hw_j^{(i)}=t.}_{\text{supstitucije unazad}}$$

Ukoliko koristimo faktorizaciju GJG^H iz (2.17) invertibilne matrice $A-\theta_0^{(i)}B$, gdje je

$J = \text{diag}\{\pm 1\}$ tada stupac $w_j^{(i)}$ matrice $W^{(i)}$ dobivamo rješavajući dva linearna sustava:

$$Gt = r_j^{(i)}, \quad G^H w_j^{(i)} = Jt.$$

Korištenje prekondicioniranog reziduala $(A-\theta_0 B)^{-1}r$ ima smisla jer ubrzava konvergenciju Ritzovih vrijednosti prema definitnom intervalu, ukoliko je zadani matrični par zaista definitan. Naime, primjena Rayleigh-Ritzove procedure na potprostor $\text{span}[x, (A-\theta_0 B)^{-1}r]$, gdje je r rezidual $r = Ax - \theta_0 Bx$, je ubrzanje jednog koraka metode inverznih iteracija [64, Odjeljak 15.9]. Više o prekondicioniranom rezidualu pogledati u Odjeljku 3.2.1.
Kako je matrica prekondicioniranog reziduala samo pomoćno sredstvo tokom ispitivanja je li hermitski matrični par definitan ili nije, može se umjesto potpune faktorizacije koristiti nepotpuna LDL^H faktorizacija:

$$A - \theta_0 B \approx LDL^H,$$

u kojoj $\approx$ uključuje ne samo uobičajeno približno jednako, nego također slučaj kada je $A - \theta_0 B - LDL^H$ približno matrica malog ranga. Detaljnije o nepotpunim faktorizacijama rijetko popunjenih matrica vidjeti u knjizi [68, Poglavlje 10], a kraći opis nekih nepotpunih faktorizacija, kao i opis rijetko popunjenog približnog inverza matrice može se naći u npr. [66, Odjeljci 3.1–3.2]. Ukoliko je zadani matrični par nastao korištenjem metode konačnih elemenata koja diskretizira parcijalni diferencijalni operator iz nekog rubnog problema, rijetko popunjene realne linearne sustave za dobivanje prekondicioniranih reziduala iz (2.18) možemo rješavati korištenjem multifrontalne metode u MA57 rutinama iz kolekcije Harwell Subroutine Library (HSL) (v. [24], [34]).

Napomena 2.15 U Algoritmu 2.5 u kojem koristimo matricu prekondicioniranog reziduala, u Liniji 11 radimo pokušaj izvršenja faktorizacije Choleskog matrice $A-\theta_0^{(i)}B$, a odmah u sljedećoj Liniji 12 rješavamo linearne sustave s tom matricom. Ako u Liniji 12 radimo hermitsku indefinitnu dekompoziciju tada se te dvije linije mogu spojiti u jednu liniju u kojoj izvršavamo potpunu hermitsku indefinitnu dekompoziciju GJG^H matrice $A - \theta_0^{(i)}B$. Ukoliko je dobiveni J pozitivno (negativno) definitna matrica, tj. $J = \text{diag}(1, \ldots, 1)$ ($J = \text{diag}(-1, \ldots, -1)$), tada je početni par (A, B) pozitivno (negativno) definitan i algoritam završava. Ukoliko je J indefinitna, matrice G, J koristimo za računanje matrice prekondicioniranog reziduala.
Također, koristeći potpunu hermitsku indefinitnu dekompoziciju GJG^H matrice $A - \theta_0^{(i)}B$ možemo, brojeći koliko J ima -1-ca na dijagonali vidjeti položaj $\theta_0^{(i)}$ unutar spektra para (A, B), ukoliko je (A, B) definitan par (v. Teorem 1.9 pod 4.). $\diamond$

Napomena 2.16 Ukoliko koristimo samo obične reziduale u test-potprostoru našeg algoritma potprostora, može se dogoditi stagnacija rubova definitnih intervala definitnih komprimiranih parova, kao što je vidljivo na gornjoj lijevoj slici Slike 2.3. To se može dinamički pratiti, tj. ukoliko nismo dobili odgovarajuće suženje definitnih intervala u nekoliko uzastopnih iteracija, možemo dodavati nove vektore u test-potprostor (posebno možemo pratiti brzinu rasta lijevih rubova i brzinu opadanja desnih rubova). Na donjoj lijevoj slici Slike 2.3 je vidljivo da ukoliko u svakoj petoj iteraciji umjesto test-potprostora oblika $\operatorname{span} U = \operatorname{span}[X, R]$ koristimo $\operatorname{span} U = \operatorname{span}[X, T \cdot R]$, tj. u svakoj petoj iteraciji koristimo umjesto matrice običnog reziduala, matricu prekondicioniranog reziduala, dobivamo značajna suženja definitnih intervala definitnih komprimiranih parova, te posljedično odluku o definitnosti danog hermitskog matričnog para u ne prevelikom broju iteracija Algoritma 2.5. $\diamond$

Sljedeća propozicija pokazuje da će naš algoritam ispitivanja potprostora, koristeći matricu običnog ili prekondicioniranog reziduala, u konačno mnogo koraka otkriti (in)definitnost danog hermitskog matričnog para za razliku od algoritama ispitivanja podmatrica iz Odjeljka 2.2.1. Ključan dio dokaza jest korištenje izračunatih Ritzovih vektora u novom test-potprostoru. Stoga je moguće koristiti i određena proširenja naših test-potprostora (v. Odjeljak 3.2.2).

Propozicija 2.17 Ukoliko je izvršen iteracijski korak i, $i = 0, 1, 2, \ldots$ Algoritma 2.5, vrijedi $\mathcal{I}^{(i+1)} \subseteq \mathcal{I}^{(i)}$, tj. definitni intervali definitnih komprimiranih parova se sužavaju (lijevi rubovi su monotono rastući, a desni rubovi su monotono padajući).

Dokaz. Za $U^{(i-1)} = [X^{(i-1)}, W^{(i-1)}]$ neka su svojstvene vrijednosti pozitivno definitnog para $((U^{(i-1)})^H A U^{(i-1)}, (U^{(i-1)})^H B U^{(i-1)})$ označene s $\theta_j^{(i)\pm}$, te neka je $X^{(i)} \in \mathbb{C}^{n \times p}$ matrica pripadnih Ritzovih vektora. Za $U^{(i)} = [X^{(i)}, W^{(i)}]$ neka su svojstvene vrijednosti pozitivno definitnog para

$$(U^{(i)H} A U^{(i)}, U^{(i)H} B U^{(i)}) \tag{2.19}$$

označene s $\theta_j^{(i+1)\pm}$. Tada za $U := [e_1, \ldots, e_p]$, gdje su e_j stupci jedinične matrice I_n vrijedi

$$\begin{aligned} U^H \Big(U^{(i)H} A U^{(i)}, U^{(i)H} B U^{(i)} \Big) U &= \\ \Big(X^{(i)H} A X^{(i)}, X^{(i)H} B X^{(i)} \Big) &= \qquad \Big(\operatorname{diag}\{\, \theta_j^{(i)+}, -\theta_j^{(i)-} \,\}, \operatorname{diag}\{\, +1, -1 \,\} \Big). \end{aligned} \tag{2.20}$$

kako je par (2.20) komprimirani par para (2.19), svojstvo isprepreplitanja svojstvenih vrijednosti (Teorem 1.20) povlači:

$$\theta_j^{(i)-} \le \theta_j^{(i+1)-}, \quad \theta_j^{(i+1)+} \le \theta_j^{(i)+},$$

pa je specijalno

$$E_l^{(i)} \le E_l^{(i+1)}, \quad E_d^{(i+1)} \le E_d^{(i)}.$$

$\square$

2.3 Numerički eksperimenti

U ovom potpoglavlju dajemo niz numeričkih eksperimenata u kojima ispitujemo (in)definitnost danog realnog simetričnog matričnog para. Koristimo nekoliko varijanti algoritma ispitivanja potprostora iz Odjeljka 2.2.2 te ih uspoređujemo s lučnim algoritmom [29]. Zatim, koristimo algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata iz Napomene 2.8 te ga uspoređujemo s algoritmom ispitivanja svih glavnih podmatrica reda 2 iz Napomene 2.12. Ukoliko algoritmi ispitivanja glavnih podmatrica reda 1 ili 2 vrate odgovor da je par (A, B) možda pozitivno definitan može se pokušati provesti faktorizacija Choleskog na matrici $A - \lambda_0 B$ za neki λ_0 unutar intervala (2.12) (za ispitivanje podmatrica reda 1) odnosno (2.15) (za ispitivanje podmatrica reda 2). O prednostima i nedostacima pokušaja te faktorizacije vidjeti opis Linije 11 u Algoritmu 2.5 iz Odjeljka 2.2.2.

2.3.1 Definitni matrični parovi dobiveni linearizacijom kvadratnog svojstvenog problema

Linearizacijom KSP-a reda n dolazimo do GSP-a reda $2n$ što povećava numerički trošak kod algoritama kao i memorijski prostor. Stoga je poželjnije raditi diretno s matricama M, C, K. U radu [29, Odjeljak 4.1] predložena je posebna verzija lučnog algoritma koji ispituje hiperbolnost zadanog KSP-a koristeći matrice M, C, K. Također, Niendorf i Voss 2010. u radu [62, Algoritam 2] predlažu algoritam ispitivanja hiperbolnosti zadanog KSP-a koristeći matrice M, C, K (za potvrdu hiperbolnosti vrše pokušaj izvršenja faktorizacije Choleskog na određenoj matrici u svakom koraku svog iterativnog algoritma). Prirodnu prilagodbu naših algoritama ispitivanja definitnosti matričnog para na ispitivanje hiperbolnosti zadanog KSP-a vidimo kroz prilagodbu algoritama iz rada [48]. U sljedećim eksperimentima koristimo linearizacijske matrične parove u svrhu ispitivanja hiperbolnosti zadanog KSP-a.

Eksperiment 2.18 U ovom eksperimentu promatramo inverzni kvadratni spektralni problem: za danih $2n$ realnih skalara i dvije matrice V_1, V_2 reda n postoje hermitske matrice M, C, K takve da je pripadni KSP

$$(\lambda^2 M + \lambda C + K)x = 0, \quad x \neq 0$$

hiperbolan sa svojstvenim vrijednostima koje su jednake zadanim skalarima, i kojemu su svojstveni vektori dani u stupcima matrica V_1, V_2. To možemo postići pomoću Matlab-ove naredbe iz kolekcije nelinearnih svojstvenih problema NLEVP [7]

```
COEFFS = nlevp('gen_hyper2',E,V);
M=COEFFS(1,3);
C=COEFFS(1,2);
K=COEFFS(1,1);
```

gdje je E vektor koji sadrži $2n$ svojstvenih vrijednosti (E je realan vektor duljine $2n$ takav da $\min(E(1:n)) > \max(E(n+1:2n)))$, $V = [V1, V2]$, a invertibilne matrice $V1, V2$ reda n su takve da $V_1 V_1^H = V_2 V_2^H$ [28]. Konkretno, koristimo (u Matlab-ovoj notaciji)

```
E = 2*n:-1:1/(10^p);
COEFFS = nlevp('gen_hyper2',E,[eye(n),gallery('orthog',n,1)]);
```

Svojstvene vrijednosti su jednake

$$\frac{1}{10^p}, \frac{2}{10^p}, \dots, \frac{2n-1}{10^p}, \frac{2n}{10^p},$$

definitni interval je $\langle \frac{n}{10^p}, \frac{n+1}{10^p} \rangle$ duljine $\frac{1}{10^p}$. Zadane matrice M, C, K su realne. Za linearizacijski par koristimo matrice

$$A = \begin{bmatrix} M & \\ & -K \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} & M \\ M & C \end{bmatrix}.$$

iz (1.21). Za ispitivanje definitnosti matričnog para (A, B) koristimo algoritam ispitivanja potprostora s različitim tipovima potprostora: $\mathrm{span}[X, R]$, $\mathrm{span}[X, T \cdot R]$, te njihovim kombinacijama. Npr. u svakoj petoj iteraciji umjesto dodavanja matrice običnog reziduala R, koristimo matricu prekondicioniranog reziduala $T \cdot R$, gdje je $T = (A - \theta_0 B)^{-1}$, a θ_0 je sredina prethodno izračunatog definitnog intervala komprimiranog para, a u sljedećoj iteraciji dodajemo matricu običnog reziduala R. Koristili smo algoritam ispitivanja potprostora bez matrice prekondicioniranja, s matricom prekondicioniranja u svakoj petoj iteraciji, u svakoj drugoj i u svakoj iteraciji i to za $n = 50$ i $n = 100$. Kako dimenzije n nisu velike, koristili smo faktorizaciju Choleskog s pivotiranjem. Dobivene matrice M, C, K pa time i A, B su guste, pa smo linearne sustave $(A - \theta_0 B)w = r$ rješavali koristeći Matlab-ov backslash \ operator koji za guste simetrične matrice koristi LDL^T faktorizaciju dobivenu pomoću Bunch-Kaufmann pivotne strategije [11]. U Tablici 2.1 dana je usporedba algoritama potprostora s lučnim algoritmom u broju pokušaja izvršenja faktorizacija Choleskog s pivotiranjem dok algoritam nije otkrio definitnost para (A, B) (oznaka > 100 označava da algoritam nije otkrio definitnost u maksimalno dozvoljenih 100 iteracija: v. Sliku 2.3). Zanimljivo je da ukoliko se koristi faktorizacija Choleskog bez pivotiranja u algoritmu potprostora uopće nema razlike u broju pokušaju izvođenja faktorizacija Choleskog, dok kod lučnog algoritma ima (za njega su rezultati dani u zagradi). Također, u Tablici 2.1 dani su rubovi zadnjeg intervala kojega je izračunao algoritam ispitivanja potprostora, a unutar kojega se nalazi definitni interval (zadnji stupac u tablici) zadanog para (A, B). Iako dodavanje matrice prekondicioniranog reziduala umjesto matrice običnog reziduala poskupljuje iteracije algoritma potprostora, vidimo da čak i dodavanje samo u svakoj petoj iteraciji značajno smanjuje ukupan broj iteracija, npr. s više od 100 na 11 (Tablica 2.1 s $n = 100$, $p = 1$).

Tablica 2.1

Usporedba algoritama ispitivanja potprostora, s i bez prekondicioniranog reziduala, s lučnim algoritmom na matričnim parovima dobivenim linearizacijom KSP iz Eksp. 2.18 za različite dimenzije n i brojeve p. Dani su brojevi pokušaja izvršenja faktorizacija Choleskog s pivotiranjem (bez pivotiranja). U zadnjem stupcu dan je definitni interval i njegova duljina. Također dani su zadnji definitni intervali komprimiranih parova izračunati pomoću algoritma ispitivanja potprostora (s 3 ili 4 decimale dobivene odsijecanjem).

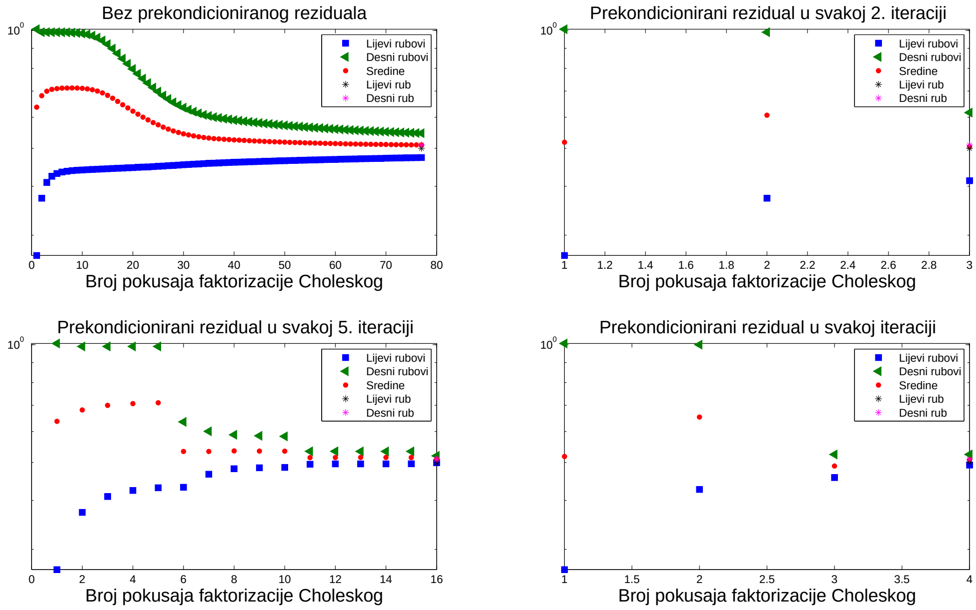
	Kada se koristi prekondicionirani rezidual u algoritmu ispitivanja potprostora				Lučni alg.	Duljina def.int.
	–	5.	2.	1.		
$n=50$ $p=0$	>100 $\langle 38.967, 98.945\rangle$	31 $\langle 49.883, 51.339\rangle$	3 $\langle 41.322, 61.658\rangle$	4 $\langle 49.030, 52.502\rangle$	7 (8)	1 $\langle 50, 51\rangle$
$n=50$ $p=1$	>100 $\langle 4.334, 9.894\rangle$	26 $\langle 4.990, 5.200\rangle$	3 $\langle 4.132, 6.165\rangle$	4 $\langle 4.925988, 5.251\rangle$	6 (5)	0.1 $\langle 5.0, 5.1\rangle$
$n=50$ $p=2$	77 $\langle 0.473, 0.546\rangle$	16 $\langle 0.499, 0.519\rangle$	3 $\langle 0.413, 0.616\rangle$	4 $\langle 0.492, 0.524\rangle$	7 (6)	0.01 $\langle 0.50, 0.51\rangle$
$n=50$ $p=3$	>100 $\langle 0.0389, 0.0989\rangle$	21 $\langle 0.0499, 0.0520\rangle$	3 $\langle 0.0413, 0.0616\rangle$	4 $\langle 0.0490, 0.0524\rangle$	9 (10)	0.001 $\langle 0.050, 0.051\rangle$
$n=50$ $p=4$	>100 $\langle 0.0037, 0.0098\rangle$	11 $\langle 0.0045, 0.0055\rangle$	3 $\langle 0.0041, 0.0061\rangle$	4 $\langle 0.0049, 0.0052\rangle$	9 (10)	0.0001 $\langle 0.0050, 0.0051\rangle$
$n=100$ $p=0$	>100 $\langle 77.041, 198.949\rangle$	26 $\langle 99.986, 102.000\rangle$	13 $\langle 99.950, 101.903\rangle$	8 $\langle 99.999, 101.002\rangle$	8 (9)	1 $\langle 99.999, 101.002\rangle$
$n=100$ $p=1$	>100 $\langle 7.954, 19.894\rangle$	11 $\langle 8.954, 11.143\rangle$	13 $\langle 9.995, 10.188\rangle$	8 $\langle 9.999, 10.100\rangle$	8 (9)	0.1 $\langle 10.0, 10.1\rangle$
$n=100$ $p=2$	7 $\langle 0.854, 1.157\rangle$	8 $\langle 0.943, 1.059\rangle$	11 $\langle 0.998, 1.020\rangle$	8 $\langle 0.999, 1.010\rangle$	8 (9)	0.01 $\langle 1.0, 1.01\rangle$
$n=100$ $p=3$	>100 $\langle 0.0838, 0.1975\rangle$	21 $\langle 0.0994, 0.1013\rangle$	11 $\langle 0.0997, 0.1019\rangle$	8 $\langle 0.1000, 0.1010\rangle$	10 (11)	0.001 $\langle 0.100, 0.101\rangle$
$n=100$ $p=4$	>100 $\langle 0.0073, 0.0198\rangle$	16 $\langle 0.009717, 0.0104\rangle$	11 $\langle 0.0099, 0.0101\rangle$	7 $\langle 0.0100, 0.0102\rangle$	8 (13)	0.0001 $\langle 0.0100, 0.0101\rangle$

Na Slikama 2.2 i 2.3 dana je povijest definitnih intervala komprimiranih parova za par (A, B) izračunatih pomoću algoritma potprostora bez i s korištenjem prekondicioniranog reziduala i to za $n = 50$, $p = 2$, te $n = 100$, $p = 0$, tim redom. Isti su rezultati za algoritme potprostora ukoliko ne koristimo i ukoliko koristimo B-ortogonalizaciju u iteraciji (u nekim je slučajevima bila potrebna reortogonalizacija). U svim eksperimentima za početni vektor u lučnom algoritmu uzimamo $I_{2n}(:, 1)$, dok kod naših algoritama za početnu matricu aproksimacija uzimamo

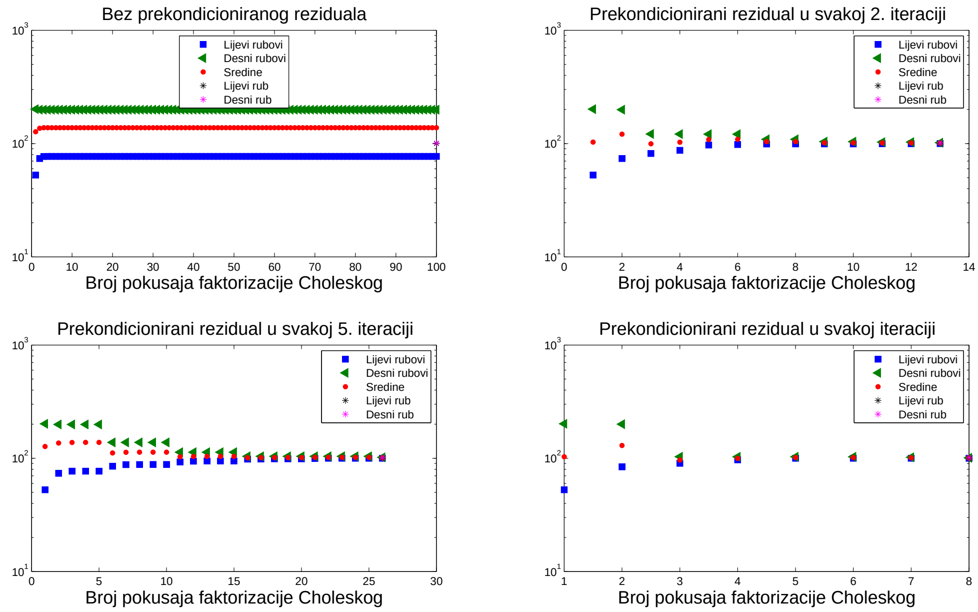
$$X^{(0)} = \begin{bmatrix} M^{-1}C(:,1) & 0 \\ -I_n(:,1) & I_n(:,1) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2n\times 2}.$$

Sada primijenimo Algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata iz Napomene 2.8 te ga usporedimo s Algoritmom ispitivanja svih glavnih podmatrica reda 2 iz Napomene 2.12 na parove (A, B) za različite n i p. Algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata za $n \in \{50, 100\}$ i $p \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ vratio je odgovor da matrični parovi nisu negativno definitni i nije formiran interval (2.12). Za $n = 50$ Algoritam ispitivanja svih glavnih podmatrica reda 2 vratio je interval (2.15) koji je otprilike jednak

$$\langle 0.59 \cdot \frac{50}{10^p}, \frac{51}{10^p} + O(10^{-15})\rangle, \quad p \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$$



Slika 2.2: Povijest definitnih intervala za par (A, B) iz Eksp. 2.18 za $n = 50$ i $p = 2$ izračunatih pomoću algoritma ispitivanja potprostora bez i s korištenjem prekondicioniranog reziduala.



Slika 2.3: Povijest definitnih intervala za par (A, B) iz Eksp. 2.18 za $n = 100$ i $p = 0$ izračunatih pomoću algoritma ispitivanja potprostora bez i s korištenjem prekondicioniranog reziduala.

dok je za $n = 100$ vratio interval (2.15) koji je otprilike jednak

$$\langle 0.588 \cdot \frac{100}{10^p}, \frac{101}{10^p} + O(10^{-13})\rangle, \quad p \in \{0, 1, 2, 3, 4\},$$

s naznakom da je zadani matrični možda pozitivno definitan. Koristeći sredinu θ_0 dobivenog intervala (2.15) pokušali smo izvršiti faktorizaciju Choleskog (iste rezultate smo dobili bez pivotiranja i s pivotiranjem) matrice $(A - \theta_0 B)$. Koraci u kojima je faktorizacija Choleskog prekinuta su:

$$\begin{aligned}
&\text{za } n = 50 \quad \text{i} \quad p \in \{0, 1\} : \; 68. \\
&\text{za } n = 50 \quad \text{i} \quad p \in \{2, 3, 4\} : \; 75. \\
&\text{za } n = 100 \;\; \text{i} \quad p \in \{0, 1\} : \; 131. \\
&\text{za } n = 100 \;\; \text{i} \quad p \in \{2, 3, 4\} : \; 148.
\end{aligned}$$

Uočimo da su desni rubovi dobivenih intervala (2.15) skoro točno izračunati (razlikuju se od pravih vrijednosti za red veličine $O(10^{-13})$ i manje), pa bi ovdje bilo prikladno koristili θ_0 malo lijevo od desnih rubova, no pitanje je kako to znati unaprijed?

Eksperiment 2.19 Promotrimo kvadratni svojstveni problem

$$(\lambda^2 M + \lambda C + K)x = 0, \quad x \neq 0$$

gdje su matrice M, C, K zadane na sljedeći način:

$$K = \begin{bmatrix} 15 & -5 & & \\ -5 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -5 \\ & & -5 & 15 \end{bmatrix}, \quad M = I_n, \quad C = 2K. \tag{2.21}$$

Ove matrice možemo dobiti naredbom `nlevp('spring',n,1,10,5,10,5)` iz kolekcije nelinearnih svojstvenih problema NLEVP [7]. KSP zadan matricama iz (2.21) je hiperbolan i svojstvene vrijednosti su mu dane eksplicitno s

$$\lambda_j^{\pm} = -\alpha_j \pm \sqrt{\alpha_j^2 - \alpha_j}, \quad \text{gdje} \quad \alpha_j = 5\Big(3 - 2\cos\frac{j\pi}{n+1}\Big), \tag{2.22}$$

za $j = 1, \ldots, n$. Kako n raste, definitni interval bilo kojeg linearizacijskog matričnog para konvergira otprilike prema

$$\langle -9.472137, -0.527864\rangle. \tag{2.23}$$

Kako su sve tri matrice M, C, K iz (2.21) pozitivno definitne, to su matrice iz oba tipa linearizacije (v. Odjeljak 1.2.6) indefinitne (i invertibilne). U ovom eksperimentu usporedit ćemo algoritam ispitivanja potprostora s lučnim algoritmom i to na oba tipa linearizacijskog para matrica (v. Odjeljak 1.2.6). Pošto su sve tri matrice M, C, K rijetko popunjene, to će i linearizacijske matrice biti rijetko popunjene pa ćemo koristiti faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja za ispitivanje definitnosti odgovarajućih matrica. Za početni vektor u lučnom algoritmu uzet ćemo $I_{2n}(:,1)$. Kod naših algoritama za početnu matricu aproksimacija uzet ćemo

$$X^{(0)} = \begin{bmatrix} C(:,1) & 0 \\ -I_n(:,1) & I_n(:,1) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2n\times 2},$$

za linearizacijski par (A, B) iz (1.21):

$$A = \begin{bmatrix} M & \\ & -K \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} & M \\ M & C \end{bmatrix}. \tag{2.24}$$

odnosno

$$X^{(0)} = \begin{bmatrix} -I_{2n}(:,2n) & I_{2n}(:,1) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2n\times 2},$$

za linearizacijski par (A', J') iz (1.24):

$$A' = \begin{bmatrix} 0 & \Omega \\ \Omega & D \end{bmatrix}, \quad J' = \begin{bmatrix} I_n & \\ & -I_n \end{bmatrix},$$

gdje je $D = \Phi^H C \Phi = 2\Omega^2$. Matricu Ω dobivamo pomoću Matlab-ovih naredbi:

```
Om2=eig(K,M);
Om=sqrtm(diag(Om2));
```

Kako su K i C tridijagonalne, k tomu je još $C = 2K$, a M je dijagonalna, koristit ćemo i transformirane matrične parove (A_1, B_1) te (A'', J'') koje ćemo dobiti transformacijom kongruencije savršenim permutiranjem matricom P i koji će biti vrpčasti. Obje matrice $A_1 = P^T A P, B_1 = P^T B P$ su petdijagonalne:

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & & & & \\ & -15 & 0 & 5 & & & \\ & & 1 & 0 & 0 & & \\ & & & -15 & 0 & 5 & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & \text{sim} & & & & \\ & & & & & & 5 \\ & & & & & & 0 \\ & & & & & & -15 \end{bmatrix}, B_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & & & & \\ & 30 & 0 & -10 & & & \\ & & 0 & 1 & 0 & & \\ & & & 30 & 0 & -10 & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & \text{sim} & & & & \\ & & & & & & -10 \\ & & & & & & 1 \\ & & & & & & 30 \end{bmatrix}. \tag{2.25}$$

Obje matrice $A'' = P^T A' P, J'' = P^T J' P$ su tridijagonalne:

$$A'' = \operatorname{diag}(A''_1, \ldots, A''_n), \quad A''_i = \begin{bmatrix} 0 & \omega_i \\ \omega_i & 2\omega_{ii}^2 \end{bmatrix}, \tag{2.26a}$$

$$J'' = \operatorname{diag}(j, \ldots, j), \quad j = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{2.26b}$$

Kod matričnih parova dobivenih transformacijom pomoću matrice P, za početnu matricu aproksimacija naših algoritama koristimo $P^T X^{(0)}$.
Želimo ispitati definitnost gornjih matričnih parova i to korištenjem algoritma ispitivanja potprostora bez prekondicioniranog reziduala (oznaka $U = [X, R]$) i s prekondicioniranim rezidualom u svakoj iteraciji (oznaka $U = [X, T \cdot R]$). Za matricu prekondicioniranja uzimamo $T = (L - \theta_0 H)^{-1}$, gdje je θ_0 je sredina prethodno izračunatog definitnog intervala komprimiranog para, a

$$(L, H) \in \{ (A, B), (A_1, B_1), (A', J'), (A'', J'') \}. \tag{2.27}$$

Linearne sustave $T^{-1} w = r$ na rijetko popunjenim matričnim parovima (A, B) i (A', J') rješavamo koristeći Matlab-ov backslash \ operator:

$$w = (L - \theta_0 H) \backslash r, \ (L, H) \in \{ (A, B), (A', J') \};$$

na petdijagonalnom matričnom paru (A_1, B_1) rješavamo koristeći simetričnu indefinitnu dekompoziciju GJG^H [75, prvi dio Poglavlja 2], ali s pivotnom strategijom danom u [11, Algoritam E], dok na tridijagonalnom matričnom paru (A'', J'') rješavamo koristeći simetričnu indefinitnu dekompoziciju GJG^H [75, prvi dio Poglavlja 2], ali s pivotnom strategijom danom u [13]. Naglasimo još jednom da se u pivotnim strategijama [11, Algoritam E] i [13] ne koristi permutiranje čime se čuva vrpčasta struktura tijekom cijelog procesa.
U Tablici 2.2 dana je usporedba algoritama potprostora (koristimo B-ortogonalizaciju u svakoj iteraciji) s lučnim algoritmom na različitim matričnim parovima dobivenim linearizacijom KSP-a iz (2.21) s $n = 250$. Dan je broj pokušaja izvršenja faktorizacija Choleskog (bez pivotiranja) odgovarajuće matrice, tj. broj iteracija uvećan za jedan kod lučnog algoritma i kod naših algoritama potprostora. Također, navedeni su koraci u kojima je faktorizacija Choleskog prekinuta. Oznaka > 30 označava da algoritam nije uspio ispitati definitnost u maksimalno dozvoljenih 30 iteracija. Napomenimo da je kod oba algoritma koja nisu uspjela ispitati definitnost unutar 30 iteracija, došlo do gubitka punog ranga stupaca matrice $U^{(0)}$ jer su stupci matrice $R^{(0)}$ skoro B-neutralni pa su izbačeni u postupku B-ortogonalizacije radi stabilnosti algoritma. Ti su stupci nadomješteni slučajnim stupcima, te nakon nove B-ortogonalizacije više nije dolazilo do smanjenja ranga.

U Tablici 2.3 dana je povijest aproksimirajućih intervala i njihovih sredina dobivenih korištenjem algoritama ispitivanja definitnosti korištenjem test-potprostora s $U = [X, R]$ i $U = [X, T \cdot R]$ za različite matrične parove dobivene linearizacijom KSP iz (2.21) s $n = 250$. Iznenađujuće je da nema razlike u granicama intervala kod korištenja test-potprostora

Tablica 2.2
Usporedba algoritama ispitivanja potprostora s lučnim algoritmom na različitim matričnim parovima dobivenim linearizacijom KSP iz Eksp. 2.19 s $n = 250$. *Broj testova* označava broj pokušaja izvršenja faktorizacije Choleskog bez pivotiranja.

Par	Algoritam	Broj testova	Korak u kojemu je fakt. Choleskog završila
(A, B)	$U = [X, R]$	> 30	253. ili 254.
	$U = [X, T \cdot R]$	2	253. 500.
	Lučni alg.	2	251. 500.
(A_1, B_1)	$U = [X, R]$	> 30	6. ili 8.
	$U = [X, T \cdot R]$	2	6. 500.
	Lučni alg.	2	2. 500.
(A', J')	$U = [X, R]$	2	251. 500.
	$U = [X, T \cdot R]$	2	251. 500.
	Lučni alg.	2	251. 500.
(A'', J'')	$U = [X, R]$	2	2. 500.
	$U = [X, T \cdot R]$	2	2. 500.
	Lučni alg.	2	2. 500.

span$[X, R]$ i span$[X, T \cdot R]$, na matričnim parovima (A', J') i (A'', J'').

Sada primijenimo algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata iz Napomene 2.8 te ga usporedimo s algoritmom ispitivanja svih glavnih podmatrica reda 2 iz Napomene 2.12 i to na sva četiri linearizacijska para. Svi su algoritmi ustanovili da matrični parovi nisu negativno definitni. Ukoliko je formiran interval (2.12) odnosno (2.15), pokušali smo izvršiti faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja, primijenjenu na matricu $(L - \theta_0 H)$ gdje je θ_0 sredina intervala, a (L, H) je redom kao u (2.27). Rezultati su dani u Tablici 2.4. Možemo uočiti da je algoritam ispitivanja svih glavnih podmatrica reda 2 iz Napomene 2.12 vratio interval koji jako dobro aproksimira pravi definitni interval (2.23) zadanog KSP-a primijenjen na matričnim parovima (A', J') i (A'', J''), a ako pogledamo Tablicu 2.3 vidimo da je i algoritam ispitivanja potprostora na tim istim matričnim parovima vratio isti interval!

2.3.2 Definitni matrični parovi s tridijagonalnom i dijagonalnom matricom

Neka je $H = [h_{ij}]_{i,j=1}^{n}$ proizvoljna hermitska matrica reda n i neka je $h_{\max} := \max_{i,j} |h_{ij}|$. Tada je matrica

$$\widehat{A} := H + \alpha I_n,$$

gdje je $\alpha := \gamma h_{\max} + \varepsilon$, $\gamma > 0$, $\varepsilon > 0$, pozitivno definitna (usp. [36, Dodatak A1]) pa je matrični par (A, J_m), gdje je

$$A := \widehat{A} + \beta J_m,\ \beta \in \mathbb{R}, \quad J_m := \mathrm{diag}(I_{n-m}, -I_m),\ m = 0, 1, \ldots, n \tag{2.28}$$

(I_0 je prazna matrica) pozitivno definitan.

Tablica 2.3

Povijest aproksimirajućih intervala i njihovih sredina dobivenih korištenjem algoritama ispitivanja potprostora s $U = [X, R]$ i $U = [X, T \cdot R]$ za različite matrične parove dobivene linearizacijom KSP iz Eksp. 2.19 s $n = 250$. Definitni interval je oko $\langle -9.473707392989788, -0.527859165565761 \rangle$.

Par (A, B)			
Potprostor	lijevi rub	sredina	desni rub
$U = [X, T \cdot R]$	-3.282559952472110e+1	-1.666666666666667e+1	-5.077338086122367e-1
	-1.667221952489425e+1	-8.589982863934635e+0	-5.077462029750183e-1

Par (A_1, B_1)			
Potprostor	lijevi rub	sredina	desni rub
$U = [X, T \cdot R]$	-3.282559952472110e+1	-1.666666666666667e+1	-5.077338086122367e-1
	-1.656676012073737e+1	-8.537253034429746e+0	-5.077459481221184e-1

Par (A', J')			
Potprostor	lijevi rub	sredina	desni rub
$U = [X, (T \cdot) R]$	-4.999843344144446e+1	-2.499921672072223e+1	0
	-9.473707392989788e+0	-5.000783279277774e+0	-5.278591655657616e-1

Par (A'', J'')			
Potprostor	lijevi rub	sredina	desni rub
$U = [X, (T \cdot) R]$	-4.999843344144446e+1	-2.499921672072223e+1	0
	-9.473707392989788e+0	-5.000783279277774e+0	-5.278591655657616e-1

Tablica 2.4

Usporedba algoritama ispitivanja podmatrica reda 1 i 2 na različitim matričnim parovima dobivenim linearizacijom KSP iz Eksp. 2.19 s $n = 250$. Interval označava interval iz (2.12) odnosno iz (2.15); $--$ označava da interval nije formiran. Zadnji stupac označava korak u kojem je prekinuta faktorizacija Choleskog bez pivotiranja, primijenjena na matricu $L - \theta_0 H$ gdje je θ_0 sredina intervala, a (L, H) je redom kao u (2.27). Korak 500. označava da je uspješno provedena faktorizacija Choleskog.

Par	Algoritam	Interval	Korak u kojemu je fakt. Chol. završila
(A, B)	1×1	$--$	$--$
	2×2	$\langle -2.949137674618944e + 1, -5.086232538105614e - 1 \rangle$	376.
(A_1, B_1)	1×1	$--$	$--$
	2×2	$\langle -2.949137674618944e + 1, -5.086232538105614e - 1 \rangle$	365.
(A', J') i (A'', J'')	1×1	$\langle -1.000156655855555e + 1, 0 \rangle$	500.
	2×2	$\langle -9.473707392989788e + 0, -5.278591655657616e - 1 \rangle$	500.

Eksperiment 2.20 U ovom eksperimentu promatramo matrični par (A, J_m) dobiven pomoću (2.28). Konkretno, koristimo $n = 500$, $m = 250$, $\varepsilon = 2$, $\gamma = 1$, $\beta = 1$ te tridijagonalnu realnu simetričnu matricu H dobivenu Matlab-ovom naredbom

```
H =gallery('clement',n);
Hmax=max(max(abs(H)));
H=H./Hmax;
```

tako da je $h_{\max} = 1$. Ovako dobivene matrice $\widehat{A}$ i A su pozitivno definitne. Iako je matrica H loše kondicionirana: $\kappa(H) = O(10^{23})$, matrica A je dobro kondicionirana: $\kappa(A) = O(1)$. Kako su matrice rijetko popunjene, koristimo faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja. Ukoliko primijenimo lučni algoritam s početnim vektorom $I_n(:, 1)$ dobivamo nakon 4 pokušaja faktorizacije Choleskog netočan odgovor: da je par (A, J_m) indefinitan sa zaključkom da je duljina luka dulja od π (izračunata duljina luka je 3.467)! U dvije iteracije su se pojavile pozitivne zakrivljenosti. No, promjena početnog vektora spašava situaciju: npr. $[1, 1, \ldots, 1]^T$ daje odmah potvrdu da je par definitan. Također, iako je to ovdje neprimjereno zbog rijetke popunjenosti matrica A i J_m, potpuno pivotiranje kod lučnog algoritma s bilo koja dva navedena početna vektora daje odmah definitnost para. Algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata iz Napomene 2.8 primijenjen na par (A, J_m) dao je odgovor da je par možda pozitivno definitan te je vratio interval $\langle -2, 4\rangle$. Za sredinu θ_0 tog intervala je matrica $A - \theta_0 J_m$ pozitivno definitna (koristili smo faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja). Algoritmom ispitivanja svih glavnih podmatrica reda 2 iz Napomene 2.12 primijenjen na par (A, J_m) također je dao odgovor da je par možda pozitivno definitan te je vratio interval $\langle -1.498997995991984, 3.498997995991984\rangle$. Za sredinu θ_0 tog intervala je matrica $A - \theta_0 J_m$ također pozitivno definitna (koristili smo faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja).

Neka je sada $n = 500$, $m = 400$, $\varepsilon = 0.01$, $\gamma = 2$, $\beta = 1$ s istom matricom H. Ovako dobivena matrica A nije pozitivno definitna. Za tako dobiveni par (A, J_m) u sljedećoj je tablici dan broj pokušaja izvršenja faktorizacije Choleskog, bez i s pivotiranjem, korištenjem lučnog algoritma:

Početni vektor	Bez pivot.	S pivot.
$[1, 0, \ldots, 0]^T$	> 100	2
$[1, 1, \ldots, 1]^T$	2	1

Bez pivotiranja pojavljuju se pozitivne zakrivljenosti u svakoj iteraciji, a oznaka > 100 znači da lučni algoritam nije uspio ispitati definitnost unutar 100 maksimalno dozvoljenih iteracija, i u tom slučaju je bilo 94 suženja luka. Ovim primjerom vidimo da na točnost (u aritmetici konačne preciznosti) lučnog algoritma jako utječe koji vektor uzimamo kao početni vektor i na koji način provodimo faktorizaciju Choleskog.

Algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata iz Napomene 2.8 primijenjen na par (A, J_m) dao je odgovor da je par možda pozitivno definitan te je vratio interval $\langle -1.01, 3.01\rangle$. Za sredinu θ_0 tog intervala je matrica $A - \theta_0 J_m$ pozitivno definitna (koristili smo faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja). Algoritmom ispitivanja svih glavnih podmatrica reda 2 iz Napomene 2.12 primijenjen na par (A, J_m) također je dao odgovor da je par možda pozitivno definitan te je vratio interval $\langle -5.089979959919837e - 1, 2.508997995991984e + 0\rangle$. Za sredinu θ_0 tog intervala je matrica $A - \lambda_0 J_m$ također pozitivno definitna (koristili smo faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja).

Ukoliko u algoritmu potprostora s $U = [X, R]$ kao početnu matricu aproksimacija uzmemo

$$X^{(0)} = \begin{bmatrix} I_n(:,1) & -I_n(:,n) \end{bmatrix}$$

bilo da koristimo faktorizaciju Choleskog bez pivotiranja ili ovdje neprikladnu faktorizaciju Choleskog s pivotiranjem, odmah dobivamo da je par (A, J_m) definitan (u oba primjera).

Sada ćemo zadati indefinitne parove (H, J_m) gdje je H kao gore i J_m kao u (2.28) za $n = 500$ i nekoliko različitih vrijednosti m. Ispitivanje indefinitnosti provodimo lučnim algoritmom i algoritmima ispitivanja potprostora. U lučnom algoritmu koristili smo vektor $[1, 1, \ldots, 1]^T$ kao početni vektor, a u algoritmima ispitivanja potprostora s test-potprostorima oblika $\operatorname{span} U = \operatorname{span}[X, R]$ i $\operatorname{span} U = \operatorname{span}[X, T \cdot R]$ koristili smo dvije matrice početnih aproksimacija:

$$X_1 = [I_{500}(:,1), -I_{500}(:,500)], \quad X_2 = [[1, \ldots, 1, \underbrace{0, \ldots, 0}_{m\,\text{komada}}]^T, [0, \ldots, 0, \underbrace{-1, \ldots, -1}_{m\,\text{komada}}]^T].$$

U Tablici 2.5 su dani rezultati ispitivanja za matrične parove

$$(H, J_m), \quad m \in \{\, 1, 100, 250, 400, 499 \,\}.$$

Svi su algoritmi jako brzo otkrili indefinitnost danih matričnih parova. Zanimljivo je uočiti da je u ovom primjeru algoritam ispitivanja potprostora koji koristi matricu prekondicioniranja u svakoj iteraciji (za rješavanje linearnih sustava koristili smo simetričnu indefinitnu dekompoziciju GJG^T [75, prvi dio Poglavlja 2], ali s pivotnom strategijom danom u [13]) sporiji od onoga koji ju ne koristi.
Algoritam ispitivanja dijagonalnih elemenata iz Napomene 2.8 primijenjen na indefinitan matrični par (H, J_m) dao je odgovor da je par možda definitan jer su svi kvocijenti dijagonalnih elemenata jednaki 0 (naime, H ima nul-dijagonalu). Algoritam ispitivanja svih glavnih podmatrica reda 2 iz Napomene 2.12 primijenjen na indefinitan matrični par (H, J_m) dao je odgovor da je par indefinitan tako što je naišao na indefinitan komprimirani par po sljedećem pravilu: za $m = k$ prvi indefinitan komprimirani par je pronađen nakon

Tablica 2.5

Usporedba lučnog algoritma i algoritama ispitivanja potprostora sa $\operatorname{span} U = \operatorname{span}[X, R]$ i $\operatorname{span} U = \operatorname{span}[X, T \cdot R]$ u otkrivanju indefinitnih matričnih parova iz Eksp. 2.20. Koraci označuju na kojem je pivotnom elementu prekinut pokušaj faktorizacije Choleskog bez pivotiranja.

	Lučni alg.	Algoritam ispitivanja potprostora	
$m = 1$	Koraci: 260,500; duljina luka $> \pi$	$U = [X, R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan
		$U = [X, R]$ i X_2 Koraci:1; 2. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_2 Koraci: 1,1,1,1,1,1,1; 8. komprimirani par je indefinitan
$m = 100$	Koraci: 160,401; duljina luka $> \pi$	$U = [X, R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan
		$U = [X, R]$ i X_2 Koraci:1; 2. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_2 Koraci: 1,133,226; 4. komprimirani par je indefinitan
$m = 250$	Koraci: 1,251,251; duljina luka $> \pi$	$U = [X, R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan
		$U = [X, R]$ i X_2 Koraci: 1; 2. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_2 Koraci: 1; 2. komprimirani par je indefinitan
$m = 400$	Koraci: 1,101; duljina luka $> \pi$	$U = [X, R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan
		$U = [X, R]$ i X_2 Koraci: 3; 2. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_2 Koraci: 3,1,1; 4. komprimirani par je indefinitan
$m = 499$	Koraci: 1,2; duljina luka $> \pi$	$U = [X, R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_1 Koraci: − 1. komprimirani par je indefinitan
		$U = [X, R]$ i X_2 Koraci: 2; 2. komprimirani par je indefinitan	$U = [X, T \cdot R]$ i X_2 Koraci: 2,2,2,2,2,2,2; 8. komprimirani par je indefinitan

ispitivanja $n - k$-tog komprimiranog para.

Eksperiment 2.21 U ovom eksperimentu koristimo fiksnu matricu A, dok matricu J mijenjamo. Zanima nas postoji li veza u broju iteracija naših algoritama i lučnog algoritma u pokušaju otkrivanja definitnosti para (A, J) u ovisnosti o inerciji indefinitne matrice J. Konkretno, pomoću pozitivno definitne matrice

$$\widehat{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix},$$

reda 500 (ovo je poznata matrica koja se pojavljuje u diskretizaciji jednodimenzionalne Poissonove jednadžbe korištenjem aproksimacija centralnim razlikama) definiramo niz pozitivno definitnih matričnih parova (A, J_m) danih s

$$A := \widehat{A} - 5J_m, \quad J_m := \mathrm{diag}(I_{n-m}, -I_m), \quad m = 1, \ldots, 499.$$

Uočimo da su A i J_m, $m = 1, \ldots, 499$ indefinitne. Izvršili smo dva tipa ispitivanja:

i) kod lučnog algoritma za početni vektor smo uzeli $I_{500}(:, 1)$, dok smo za matricu početnih aproksimacija kod naših algoritama ispitivanja potprostora uzeli

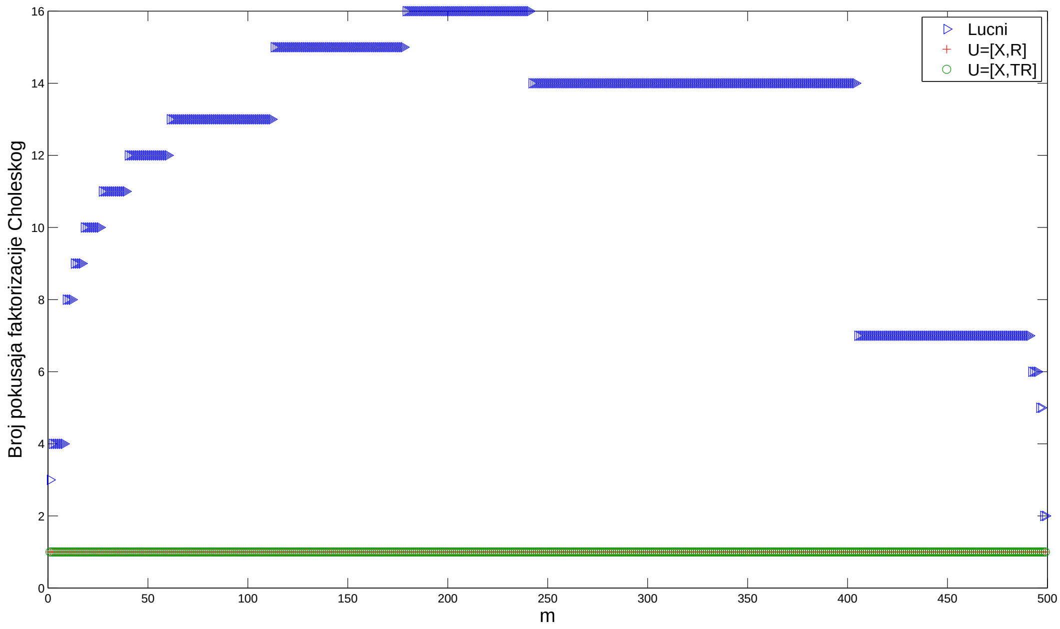
$$X^{(0)} = [I_{500}(:, 1), -I_{500}(:, 500)];$$

ii) kod lučnog algoritma za početni vektor smo uzeli $[1, \ldots, 1]^T$ dok smo za matricu početnih aproksimacija kod naših algoritama ispitivanja potprostora uzeli

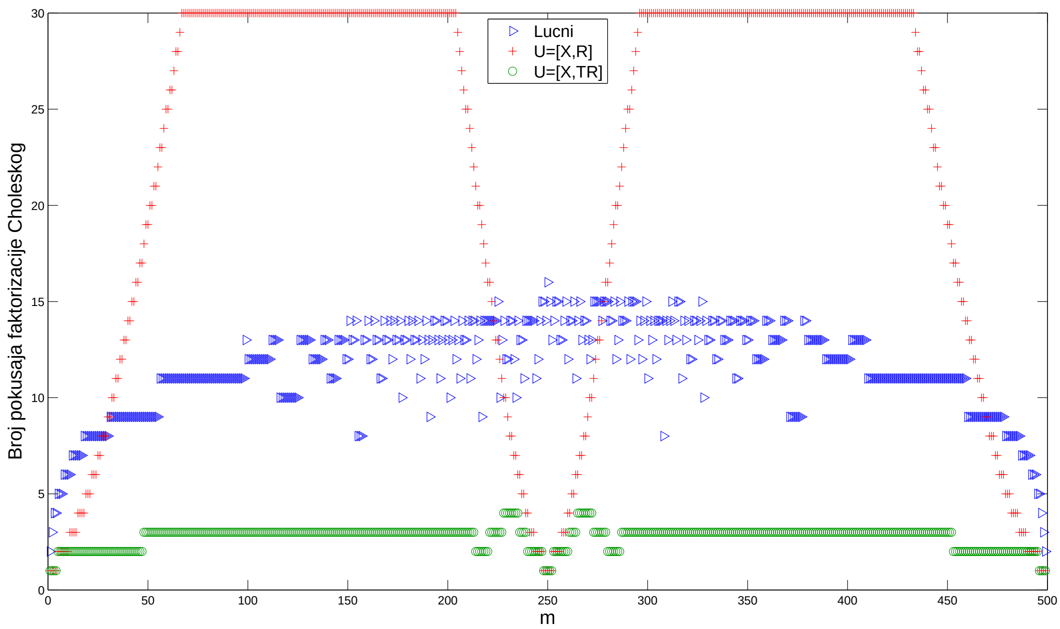
$$X^{(0)} = [[1, \ldots, 1, \underbrace{0, \ldots, 0}_{m\,\text{komada}}]^T, [0, \ldots, 0, \underbrace{-1, \ldots, -1}_{m\,\text{komada}}]^T].$$

Kako su matrice rijetko popunjene, spremili smo ih u Matlab-ovom sparse formatu te smo za pokušaj izvršenja faktorizacije Choleskog koristili jako brzu Matlab-ovu funkciju `chol` koja koristi skup rutina CHOLMOD [15, 21], dok smo za rješavanje linearnih sustava u algoritmu potprostora s $U = [X, T \cdot R]$ koristili Matlab-ov backslash operator \ koji također koristi jako brzi skup rutina CHOLMOD. Uspoređivali smo konačan broj pokušaja izvršenja faktorizacija Choleskog prije nego što je pojedini algoritam dao potvrdu o definitnosti danog matričnog para u odnosu na broj m o kojem ovisi inercija matice J_m. Koristili smo lučni algoritam, te naše algoritme ispitivanja potprostora s $U = [X, R]$ i $U = [X, T \cdot R]$, gdje je matrica prekondicioniranja korištena u svakoj iteraciji. Dozvolili smo maksimalno 31 iteraciju, odnosno maksimalno 30 pokušaja izvršenja faktorizacije Choleskog. Na Slici 2.4 dani su rezultati ispitivanja kod ispitivanja tipa i) i tipa ii). Na podslici (a) vidimo da je odmah u prvom pokušaju provođenja faktorizacije Choleskog ona uspješno provedena s našim algoritmom ispitivanja potprostora bez obzira na inerciju matrice J_m, dok je lučnom algoritmu bio potreban različit broj pokušaja za različite vrijednosti broja m. Na podslici (b) vidimo simetriju u odnosu na $m = 250$ u broju iteracija naših algoritama. Zanimljivo je uočiti da u ovom primjeru, u ispitivanju tipa ii), ukoliko imamo jako malo jednih J_m predznaka u odnosu na druge (npr. do 10 jedinica, a ostalo su minus jedinice u J_m) ili podjednako jednih i drugih, našim algoritmima ispitivanja potprostora s $U = [X, R]$, odnosno $U = [X, T \cdot R]$ potreban je isti ili skoro isti broj iteracija za završetak ispitivanja. Lučnom algoritmu je u većini slučajeva bilo potrebno između 10 i 15 iteracija, te oko 5 iteracija ako je samo nekoliko jednih J_m predznaka u odnosu na druge. Algoritmu ispitivanja potprostora s $U = [X, T \cdot R]$ nije bilo potrebno više od 4 iteracije za sve $m = 1, \ldots, 499$.

Napomena 2.22 Algoritmi ispitivanja glavnih podmatrica reda 1 i 2 primijenjeni na



(a) ispitivanje tipa i)



(b) ispitivanje tipa ii)

Slika 2.4: Konačan broj pokušaja izvršanja faktorizacije Choleskog ($\triangleright$ za lučni alg., $+$ za alg. potprostora s $U = [X, R]$, $\circ$ za alg. potprostora s $U = [X, T \cdot R]$) u otkrivanju definitnosti na nizu definitnih parova (A, J_m) iz Eksp. 2.21 nasuprot inerciji matrice J_m.

definitan matrični par, mogu vratiti jako dobru aproksimaciju definitnog intervala (v. Tablicu 2.4).

U slučaju definitnih matričnih parova primjenom test-potprostora s $U = [X, T \cdot R]$ umjesto s $U = [X, R]$ u nekim ili svim iteracijskim koracima algoritma ispitivanja potprostora dobivamo značajno smanjenje ukupnog broja iteracijskih koraka pa i samo ubrzanje ispitivanja (v. Sliku 2.2 i Sliku 2.4 pod (b)).

Također, eksperimenti pokazuju da naš algoritam ispitivanja potprostora može konkurirati lučnom algoritmu u broju iteracijskih koraka (v. Sliku 2.4), te da je za razliku od lučnog algoritma neosjetljiv na način provođenja faktorizacije Choleskog.

Poglavlje 3

Računanje unutarnjih svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora definitnih matričnih parova

U Poglavlju 2 bavili smo se ispitivanjem je li dani hermitski matrični par definitan ili nije, na način da smo računali rubove intervala (koji su se u svakom izvršenom koraku algoritma ispitivanja potprostora, Algoritam 2.5, sužavali) koji sadrže njegov definitan interval, ukoliko se radi o definitnom paru. U slučaju da je matrični par definitan, algoritam ispitivanja potprostora daje jedan definitni pomak (koji se nalazi u definitnom intervalu tog matričnog para). Ukoliko želimo izračunati svojstvene vrijednosti oko definitnog intervala, onda možemo nastaviti dalje korisiti Algoritam 2.5 (bez linija koje služe za provjeru definitnosti). U tom slučaju, dani definitni pomak nam pomaže u dobivanju aproksimacija željenih svojstvenih vrijednosti oko definitnog intervala jer zapravo želimo izračunati prvih nekoliko svojstvenih vrijednosti koje su desno od tog definitnog pomaka, i prvih nekoliko svojstvenih vrijednosti koje su lijevo od tog definitnog pomaka. U tom je slučaju korištena matrica prekondicioniranja pozitivno definitna.

U Potpoglavljima 3.1–3.3 predlažemo nove algoritme koji računaju manji broj svojstvenih vrijednosti oko definitnog intervala i pridruženih svojstvenih vektora pozitivno definitnih matričnih parova (A, B) u kojima je matrica B indefinitna (B može i ne mora biti invertibilna). Algoritmi su posebno pogodni za velike rijetko popunjene matrice. U Potpoglavlju 3.1 predlažemo jednu opću indefinitnu metodu iz koje se može iznjedriti pregršt algoritama koji su indefinitna verzija standardnih algoritama za traženje *ekstremnih* tj. *vanjskih* svojstvenih vrijednosti i pridruženih svojstvenih vektora definitnog para (A, B) kod kojih je B definitna matrica. U Potpoglavlju 3.2 predlažemo jednu klasu indefinitnih prekondicioniranih gradijentnih iteracija koje koriste jedan ili dva definitna pomaka. Ukoliko se pažljivo reorganiziraju algoritmi Potpoglavlja 3.2 primijenjeni na produktni svojstveni problem, dobiva se specijalizirani algoritam, koji čuva strukturu produktnog problema, izveden u Potpoglavlju 3.3. U zadnjem potpoglavlju predlažemo algoritme za računanje manjeg broja svojstvenih vrijednosti oko bilo kojeg pomaka, a da to sada više nije definitan pomak, i pridruženih svojstvenih vektora pozitivno definitnog para (A, B).

Najmanja i najveća svojstvena vrijednost definitnog matričnog para zovu se *vanjske* (ekstremne, rubne) jer se nalaze na rubovima segmenta koji sadrži cijeli spektar. Tada sve ostale svojstvene vrijednosti nazivamo *unutarnjim.* Ako se traži nekoliko svojstvenih vrijednosti, to se obično istovremeno traži nekoliko uzastopnih svojstvenih vrijednosti, npr. traži se prvih nekoliko najmanjih ili prvih nekoliko najvećih. U tom bismo slučaju rekli da se traži nekoliko vanjskih svojstvenih vrijednosti. Tada sve ostale svojstvene vrijednosti nazivamo unutarnjim. Mi ćemo u ovom poglavlju pod pojmom *nekoliko unutarnjih svojstvenih vrijednosti* podrazumijevati nekoliko uzastopnih svojstvenih vrijednosti s lijeva i nekoliko uzastopnih svojstvenih vrijednosti s desna u odnosu na dani pomak, tj. neki broj unutar rubova spektra (eng. shift).

3.1 Opća indefinitna metoda

Neka su $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitske matrice takve da matrica B ima inerciju $\mathsf{In}(B) = (n_+, n_-, n_0) \geq (1, 1, 0)$, gdje se nejednakost podrazumijeva po elementima, i neka je par (A, B) pozitivno definitan s konačnim svojstvenim vrijednostima poredanim na sljedeći način:

$$\lambda^-_{n_-} \leq \cdots \leq \lambda^-_1 < \lambda^+_1 \leq \cdots \leq \lambda^+_{n_+}, \quad n_- + n_+ = \mathrm{rang}(B) \tag{3.1a}$$

i beskonačnim svojstvenim vrijednostima označenima s

$$\lambda^\infty_i = \infty, \ \text{ za } \ 1 \leq i \leq n_0. \tag{3.1b}$$

Dakle, definitni interval je jednak $\langle \lambda^-_1, \lambda^+_1 \rangle$. Neka je $U \in \mathbb{C}^{n\times p}$ bilo koja matrica punog stupčanog ranga. Neka su konačne svojstvene vrijednosti pozitivno definitnog komprimiranog para $(U^H AU, U^H BU)$ poredane kako slijedi

$$\theta^-_{p_-} \leq \cdots \leq \theta^-_1 < \theta^+_1 \leq \cdots \leq \theta^+_{p_+}, \tag{3.2}$$

gdje $\mathsf{In}(U^H BU) = (p_+, p_-, p_0)$. Sjetimo se, svojstvo ispreplitanja svojstvenih vrijednosti (Teorem 1.20) daje

$$\lambda^+_i \leq \theta^+_i \leq \lambda^+_{i+n-p} \quad \text{za} \quad 1 \leq i \leq p_+, \tag{3.3a}$$

$$\lambda^-_j \geq \theta^-_j \geq \lambda^-_{j+n-p} \quad \text{za} \quad 1 \leq j \leq p_-, \tag{3.3b}$$

gdje formalno stavljamo $\lambda^+_i = +\infty$ za $i > n_+$ i $\lambda^-_j = -\infty$ za $j > n_-$. Također, definirajmo

$$J_k := \begin{bmatrix} I_{k_+} & \\ & -I_{k_-} \end{bmatrix} \tag{3.4}$$

za neke prirodne brojeve k_+, k_- takve da $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}(B)$. Sjetimo se, primijenjujući princip minimizacije traga [41, 49] na (A, B) i $(U^H AU, U^H BU)$, tim redom, uz dodatnu pretpostavku $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}(U^H BU)$, te koristeći (3.3a), (3.3b) dobivamo

$$\min_{\substack{X \in \mathbb{C}^{n\times k} \\ X^H BX = J_k}} \operatorname{tr}(X^H AX) = \sum_{i=1}^{k_+} \lambda_i^+ - \sum_{j=1}^{k_-} \lambda_j^- \leq \tag{3.5a}$$

$$\sum_{i=1}^{k_+} \theta_i^+ - \sum_{j=1}^{k_-} \theta_j^- = \min_{\substack{Y \in \mathbb{C}^{p\times k} \\ Y^H (U^H BU) Y = J_k}} \operatorname{tr}(Y^H (U^H AU) Y) \tag{3.5b}$$

s jednakosti ako i samo ako je $\operatorname{span} U$ razapet sa svojstvenim vektorima para (A, B) koji pripadaju $\lambda_1^+, \ldots, \lambda_{k_+}^+$ i $\lambda_1^-, \ldots, \lambda_{k_-}^-$. Ti svojstveni vektori čine stupce u minimizirajućoj matrici $X_{\min}$ funkcije iz (3.5a).

Za dane male prirodne brojeve $k_\pm$ naš je cilj odrediti minimum i minimizirajuću matricu $X_{\min}$ funkcije iz (3.5a), tj. izračunati k_- najvećih $B-$negativnih svojstvenih vrijednosti $\lambda_1^-, \ldots, \lambda_{k_-}^-$ i k_+ najmanjih $B-$pozitivnih svojstvenih vrijednosti $\lambda_1^+, \ldots, \lambda_{k_+}^+$ i pridružene svojstvene vektore para (A, B). Razmatrajući (3.5a), (3.5b) računamo aproksimacije željenih svojstvenih parova iz danog potprostora $\mathcal{U}$ s baznom matricom U primjenjujući Rayleigh-Ritzovu proceduru: izračunamo sve svojstvene parove malog komprimiranog para $(U^H AU, U^H BU)$ i zapamtimo samo one svojstvene vrijednosti koje se nalaze oko njegovog definitnog intervala: $\theta_j^\pm$, $j = 1, \ldots, k_\pm$ i pridružene svojstvene vektore: $y_j^\pm$, $j = 1, \ldots, k_\pm$. Pretpostavljamo da su ti svojstveni vektori normirani tako da

$$(y_j^\pm)^H (U^H BU) y_i^\pm = \pm\delta_{ij},$$

gdje je δ_{ij} Kroneckerov delta simbol. Ritzovi parovi para (A, B) u odnosu na potprostor $\mathcal{U}$ su tada dani s $(\theta_j^\pm, x_j^\pm) = (\theta_j^\pm, Uy_j^\pm)$ za $j = 1, \ldots, k_\pm$ (uočimo da su Ritzovi vektori B-normirani). Tada je potrebno iterirati potprostore $\mathcal{U}$ da bi se smanjio konačan trag.

Kako birati potprostore je netrivijalno pitanje. Povećavanje dimenzije potprostora u svakoj iteraciji može doprinijeti ubrzanju konvergencije, ali zahtjeva više memorijskog prostora na računalu, od iteracija s fiksnom dimenzijom potprostora. "Vrstu" potprostora možemo birati po uzoru na mnogobrojne iterativne algoritme za računanje manjeg broja svojstvenih parova hermitske matrice ili hermitskog matričnog para s barem jednom definitnom matricom. Stoga, možemo predstaviti mnoge nove indefinitne metode birajući prikladan potprostor i primjenjujući Rayleigh-Ritzovu proceduru pamteći svojstvene parove oko definitnog intervala. Ti potprostori moraju sadržavati barem onoliko B-pozitivnih i B-negativnih vektora koliko svojstvenih parova želimo izračunati. Stoga, po uzoru na [66,

Algoritam 3.1 Opća indefinitna metoda

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: koeficijenti pozitivno definitnog matričnog para (A, B) takvog da $\mathsf{In}(B) \geq (k_+, k_-, 0)$;

Izlaz: k_+ najmanjih B-pozitivnih svojstvenih parova i k_- najvećih B-negativnih svojstvenih parova.

1: **za** $i = 0, 1, 2, \ldots$ **čini**

2: Konstruirati potprostor $\mathcal{U}^{(i)}$ dimenzije $p \ll n$ takav da $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}\Big((U^{(i)})^H BU^{(i)}\Big)$ vrijedi za svaku matricu baze $U^{(i)}$.

3: Primijeniti Rayleigh-Ritzovu proceduru na (A, B) u odnosu na potprostor $\mathcal{U}^{(i)}$ i zapamtiti k_+ najmanjih B-pozitivnih i k_- najvećih B-negativnih Ritzovih parova.

4: **kraj za**

Algoritam 2.1] u Algoritmu 3.1 dajemo opću indefinitnu metodu za računanje svojstvenih parova oko definitnog intervala danog pozitivno definitnog matričnog para.

Ako je potprostor razapet s Ritzovim vektorima, izračunatima u prethodnoj iteraciji, sadržan u prostoru $\mathcal{U}^{(i)}$ Algoritma 3.1 za $i = 1, 2, \ldots$, tada će izabiranje prikladnog početnog potprostora (vidi Lemu 1.25) omogućiti da $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}\Big((U^{(i)})^H BU^{(i)}\Big)$ vrijedi za svaku matricu baze $U^{(i)}$ od $\mathcal{U}^{(i)}$ za sve $i = 1, 2, \ldots$ Neki izbori potprostora $\mathcal{U}^{(i)}$ Algoritma 3.1 mogu, uz dobru separaciju željenih svojstvenih vrijednosti, dovesti do brze konvergencije.

Ukoliko je potprostor razapet s Ritzovim vektorima, izračunatima u prethodnoj iteraciji, sadržan u prostoru $\mathcal{U}^{(i)}$, tada možemo pokazati da se definitni intervali definitnih komprimiranih parova dobivenih Algoritmom 3.1 sužavaju: da su lijevi rubovi monotono rastući, a desni rubovi monotono padajući, tj. na ovaj način smanjujemo trag funkcije iz (3.5a). Iz svojstva ispreplitanja svojstvenih vrijednosti slijedi ograničenost niza lijevih i niza desnih rubova definitnih intervala. Naime, vrijedi lema:

Lema 3.1 Neka su konačne svojstvene vrijednosti pozitivno definitnog matričnog para (A, B) dane s (3.1a). Neka su Ritzove vrijednosti u koraku i Algoritma 3.1 dane s

$$\theta_{k_-}^{(i+1)-} \leq \cdots \leq \theta_1^{(i+1)-} < \theta_1^{(i+1)+} \leq \cdots \leq \theta_{k_+}^{(i+1)+}, \tag{3.6}$$

s odgovarajućim Ritzovim vektorima $x_{k_-}^{(i+1)-}, \ldots, x_1^{(i+1)-}, x_1^{(i+1)+}, \ldots, x_{k_+}^{(i+1)+}$. Nadalje, pretpostavimo da

$$\{\, x_{k_-}^{(i)-}, \ldots, x_1^{(i)-}, x_1^{(i)+}, \ldots, x_{k_+}^{(i)+} \,\} \subseteq \mathcal{U}^{(i)}.$$

Tada vrijede sljedeće relacije

$$\lambda_j^+ \leq \theta_j^{(i+1)+} \leq \theta_j^{(i)+}, \quad 1 \leq j \leq k_+, \tag{3.7}$$

$$\theta_j^{(i)-} \leq \theta_j^{(i+1)-} \leq \lambda_j^-, \quad 1 \leq j \leq k_-, \tag{3.8}$$

$$(A - \theta_j^{(i)\pm} B)x_j^{(i)\pm} \perp \mathcal{U}^{(i)}, \quad 1 \leq j \leq k_\pm. \tag{3.9}$$

Dokaz. Uvjet okomitosti dokazujemo isto kao što je dokazano u [66, Lemma 2.1.1], a nejednakosti dokazujemo analogno kao u Propoziciji 2.17. □

Ako dodatno pretpostavimo da su reziduali $r_j^{(i)\pm} := Ax_j^{(i)\pm} - \theta_j^{(i)\pm} Bx_j^{(i)\pm}$ sadržani u $\mathcal{U}^{(i)}$ za $1 \le j \le k_\pm$ tada svaki od nizova $\{\, \theta_j^{(i)\pm} \,\}_{i=1}^{\infty}$ konvergira k nekoj svojstvenoj vrijednosti para (A, B), a pripadni Ritzovi vektori u smjeru konvergiraju pridruženim svojstvenim vektorima.

Lema 3.2 Neka vrijede pretpostavke Leme 3.1, i dodatno pretpostavimo da su Ritzovi vektori skalirani tako da $(x_j^{(i)\pm})^H B x_j^{(i)\pm} = \pm 1$ i da su reziduali $r_j^{(i)\pm} = Ax_j^{(i)\pm} - \theta_j^{(i)\pm} Bx_j^{(i)\pm}$ elementi prostora $\mathcal{U}^{(i)}$ za $1 \le j \le k_\pm$.
Tada za svaki $s = 1, 2, \ldots, k_\pm$ niz $\{\, \theta_s^{(i)\pm} \,\}_{i=1}^{\infty}$ konvergira nekoj svojstvenoj vrijednosti $\hat\lambda^\pm$ para (A, B), a niz $\{\, \|(A - \hat\lambda^\pm B)x_s^{(i)}\| \,\}_{i=1}^{\infty}$ konvergira k nuli.

Dokaz. Dio leme koji se odnosi na B-pozitivne Ritzove parove dokazujemo isto kao što je dokazano u [66, Lema 2.1.2], dok se dio za B-negativne dokazuje isto uz nekoliko promjena predznaka ili znakova nejednakosti. □

3.2 Indefinitne varijante m-sheme prekondicioniranih gradijentnih iteracija

U ovom potpoglavlju predlažemo nove jednostavne iterativne metode koje se uklapaju u opću indefinitnu metodu za računanje unutarnjih svojstvenih parova oko definitnog intervala pozitivno definitnog matričnog para.

3.2.1 Prekondicionirane gradijentne iteracije

Neka su $\tilde{A}, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitske i neka je $\tilde{A}$ pozitivno definitna. Kratko ćemo ponoviti tri poznate prekondicionirane gradijentne iteracije za računanje najmanje svojstvene vrijednosti i pripadnog svojstvenog vektora generaliziranog svojstvenog problema

$$\tilde{A}x = \tilde\lambda Bx. \tag{3.10}$$

Neka

$$\tilde\rho(x) = \frac{x^H \tilde{A} x}{x^H B x}, \quad x^H B x \neq 0 \tag{3.11}$$

označava Rayleighjev kvocijent para $(\tilde{A}, B)$. U slučajevima kada B nije pozitivno definitna, obično se promotra dualni GSP: $Bx = \tilde\mu \tilde{A} x$ s $\tilde\mu := 1/\tilde\rho$ i traži se najveća svojstvena vrijednost, i odgovarajući svojstveni vektor. Neka $x^{(i)}$ označava trenutnu aproksimaciju svojstvenog vektora koji odgovara najmanjoj svojstvenoj vrijednosti od $(\tilde{A}, B)$. Metoda inverznih iteracija (INVIT), uz odgovarajuće normiranje iteracijskih vektora, je oblika:

$$x^{(i+1)} := \tilde{A}^{-1} B x^{(i)}, \text{ odnosno } \tilde{A}x^{(i+1)} = Bx^{(i)} \tag{3.12}$$

Ukoliko zapišemo $x^{(i+1)}$ iz (3.12) (odnosno, njegov višekratnik) pomoću trenutnog reziduala $r^{(i)} := \tilde{A}x^{(i)} - \tilde{\rho}(x^{(i)})Bx^{(i)}$ dobivamo

$$\tilde{\rho}_i x^{(i+1)} = \tilde{\rho}_i \tilde{A}^{-1}Bx^{(i)} = x^{(i)} - x^{(i)} + \tilde{\rho}_i \tilde{A}^{-1}Bx^{(i)} = x^{(i)} - \tilde{A}^{-1}r^{(i)}$$

gdje $\tilde{\rho}_i := \tilde{\rho}(x^{(i)})$. Ponekad matrica $\tilde{A}$, pa niti njen inverz nisu dostupni, dostupne su samo neke njene aproksimacije, kao što je npr. slučaj u diskretizaciji parcijalnih diferencijalnih jednadžbi (radimo s matricom diskretizacije koja je dobivena npr. metodom konačnih elemenata). Stoga u metodi prekondicioniranih inverznih iteracija (PINVIT) umjesto djelovanja matricom $\tilde{A}^{-1}$ koristimo matricu T :

$$x^{(i+1)} := x^{(i)} - Tr^{(i)} = x^{(i)} - T(\tilde{A}x^{(i)} - \tilde{\rho}_i Bx^{(i)}). \tag{3.13}$$

Da bismo uvidjeli što utječe na konvergenciju metode PINVIT-a, uočavamo da se (3.13) može smatrati perturbiranom inverznom iteracijom:

$$\begin{aligned}
x^{(i+1)} &= x^{(i)} - Tr^{(i)} = x^{(i)} - T\tilde{A}x^{(i)} + \tilde{\rho}_i TBx^{(i)} + \tilde{\rho}_i \tilde{A}^{-1}Bx^{(i)} - \tilde{\rho}_i \tilde{A}^{-1}Bx^{(i)} = \\
&= \tilde{\rho}_i \tilde{A}^{-1}Bx^{(i)} - T\tilde{A}(x^{(i)} - \tilde{\rho}_i \tilde{A}^{-1}Bx^{(i)}) + x^{(i)} - \tilde{\rho}_i \tilde{A}^{-1}Bx^{(i)} = \\
&= \tilde{\rho}_i \tilde{A}^{-1}Bx^{(i)} + (I - T\tilde{A})(x^{(i)} - \tilde{\rho}_i \tilde{A}^{-1}Bx^{(i)}).
\end{aligned}$$

Dakle, što je izraz $I - T\tilde{A}$ (u nekoj normi) manji, to je metoda PINVIT-a bliža metodi INVIT-a. Hermitsku pozitivno definitnu matricu $T \in \mathbb{C}^{n \times n}$, zovemo *matrica prekondicioniranja*[1] i uobičajeno $T \approx \tilde{A}^{-1}$. Iz (3.13) možemo vidjeti da se smjer sljedećeg iteracijskog vektora dobiva kao fiksna linearna kombinacija trenutnog smjera i prekondicioniranog reziduala. Poboljšanje metode PINVIT-a je iteracija prekondicioniranog najbržeg spusta (eng. preconditioned steepest descent, PSD) koja je sljedećeg oblika:

$$x^{(i+1)} := x^{(i)} - \tau^{(i)}Tr^{(i)} = x^{(i)} - \tau^{(i)}T(\widetilde{A}x^{(i)} - \tilde{\rho}_i Bx^{(i)}) \tag{3.14}$$

gdje se skalarni iteracijski parametar $\tau^{(i)}$ izabire tako da $\tilde{\rho}(x^{(i+1)})$ bude minimalno. U vidu prednosti koju Lanczosov algoritam ima u odnosu na metodu INVIT-a, ima smisla uzeti u obzir i prethodno izračunati smjer. Tako je Knyazev 1991. u radu [38] predložio lokalno optimalnu iteraciju prekondicioniranih konjugiranih gradijenata (LOPCG) koja je sljedećeg oblika:

$$x^{(i+1)} := x^{(i)} - \gamma^{(i)}x^{(i-1)} - \tau^{(i)}Tr^{(i)} = x^{(i)} - \gamma^{(i)}x^{(i-1)} - \tau^{(i)}T(\widetilde{A}x^{(i)} - \tilde{\rho}(x^{(i)})Bx^{(i)}) \tag{3.15}$$

gdje se skalarni iteracijski parametri $\gamma^{(i)}$ i $\tau^{(i)}$ izabiru tako da $\tilde{\rho}(x^{(i+1)})$ bude minimalno. Prekondicionirani reziduali $w^{(i)} := Tr^{(i)}$ dobivaju se rješavanjem linearnog sustava jed-

[1] U pojedinoj literaruri se matrica T^{-1} zove matrica prekondicioniranja i u tom slučaju $T \approx \tilde{A}$.

nadžbi $T^{-1}w^{(i)} = r^{(i)}$ (to su sustavi s matricom $\tilde{A}$ ili nekom njenom aproksimacijom). U diskretizaciji eliptičkog i samo-adjungiranog parcijalno diferencijalnog operatora, simetrične pozitivno definitne geometrijske ili algebarske multigridne matrice prekondicioniranja V-ciklusa se uobičajeno koriste (npr. implementacija `HSL_MI20` [34]) . Te se matrice prekondicioniranja mogu realizirati s optimalnom složenošću (u smislu da numerički trošak raste samo linearno po broju nepoznanica) i, u najboljem slučaju, konvergencijska brzina odgovarajuće metode za djelomični svojstveni problem, ne ovisi o profinjenosti diskretizacije [37].

Osnovna i neefikasna gradijentna iteracija za aproksimaciju najmanje svojstvene vrijednosti matričnog para iz (3.10) je oblika

$$x^{(i+1)} := x^{(i)} - \omega_i \nabla\tilde{\rho}(x^{(i)}),$$

gdje je gradijent $\nabla\tilde{\rho}(x) = \frac{2(\tilde{A}x-\tilde{\rho}(x)Bx)}{x^H Bx}$, a ω_i skalarni parametar. Uočimo da je trenutni rezidual $r := \tilde{A}x - \tilde{\rho}(x)Bx$ kolinearan s gradijentom. PINVIT, PSD i LOPCG iteracije spadaju u klasu *prekondicioniranih gradijentnih iteracija*, jer za danu matricu prekondicioniranja T, koriste T-gradijent od $\tilde{\rho}$. T-gradijent je definiran s

$$\nabla_T\tilde{\rho}(x) := T\nabla\tilde{\rho}(x) = T\frac{2(\tilde{A}x - \tilde{\rho}(x)Bx)}{x^H Bx}.$$

Tako PSD iteracija računa niz iteracijskih vektora s opadajućim Rayleighjevim kvocijentima uzastopnim korekcijama u smjeru negativnog T-gradijenta trenutnog iteracijskog vektora. LOPCG, dodatno sadrži i optimalni smjer prethodnog iteracijskog vektora.

Napomena 3.3 Računanje optimalnih skalarnih iteracijskih parametara $\tau^{(i)}$ i/ili $\gamma^{(i)}$ u (3.14) i (3.15) ne izvršava se nekom optimizacijskom metodom. Naime, ti su parametri dani samo implicitno. Ako je x svojstveni vektor, tada je to i αx, $\alpha \neq 0$, pa mi zapravo želimo izračunati smjer sljedećeg iteracijskog vektora. Iz (3.14) ((3.15)) vidimo da je sljedeći iteracijski vektor $x^{(i+1)}$ u potprostoru span$[x^{(i)}, w^{(i)}]$ (span$[x^{(i)}, x^{(i-1)}, w^{(i)}]$) gdje je $w^{(i)} = Tr^{(i)}$ prekondicionirani rezidual trenutnog iteracijskog vektora $x^{(i)}$. Tako gledajući, najbolje aproksimacije za svojstveni par iz danog potprostora su dane Rayleigh-Ritzovom procedurom. Ako $w^{(i)}$ nije svojstveni vektor tada je $(x^{(i+1)}, \tilde{\rho}(x^{(i+1)}))$ Ritzov par para $(\tilde{A}, B)$ u odnosu na potprostor span$[x^{(i)}, w^{(i)}]$ (span$[x^{(i)}, x^{(i-1)}, w^{(i)}]$). Kako je cilj PSD (LOPCG) iteracije minimizirati Rayleighjev kvocijent, $\tilde{\rho}(x^{(i+1)})$ je manja (najmanja) Ritzova vrijednost i $x^{(i+1)}$ je pridružen Ritzov vektor.

Ako želimo naći nekoliko najmanjih svojstvenih parova GSP-a (3.10) tada možemo koristiti blok, tj. potprostorne verzije iteracija (3.14) i (3.15): BPSD i LOBPCG [39, 40]. Oštra konvergencijska ocjena za PSD (3.14) iteraciju je dana u [56, Teorem 1.2], dok je za BPSD dana u [61]. Za ocjenu je nužno da su $\tilde{A}$ i matrica prekondicioniranja T realne simetrične pozitivno definitne, dok B može biti samo realna simetrična. Standardne prekondicionirane gradijente iteracije, poput BPSD i LOBPCG, rade sa skalarnim produktom induciranim s pozitivno definitnom matricom i cilj im je izračunati najmanju ili najveću svojstvenu vrijednost, tj. vanjske svojstvene vrijednosti i odgovarajuće svojstvene vektore (ili njih nekoliko). Te se iteracije mogu, na prirodan način, prilagoditi tako da računaju svojstvene vrijednosti oko definitnog intervala (koji može biti u sredini spektra) i pridružene svojstvene vektore definitnih matričnih parova s indefinitnim matricama. Tada te nove metode rade s indefinitnim skalarnim produktom. U radu [42] su predložene nove indefinitne varijante LOBPCG iteracije. U Odjeljku 3.2.2 predlažemo cijelu novu klasu indefinitnih varijanti prekondicioniranih gradijentnih iteracija koje uključuju indefinitni LOBPCG [42].

3.2.2 Indefinitna varijanta m-sheme s jednom matricom prekondicioniranja

Neymeyr je 2001. predložio u [57] (v. i [58]) k-shemu iteracija koje predstavljaju jednu klasu prekondicioniranih gradijentnih metoda koje računaju najmanji svojstveni par, ili nekoliko najmanjih, GSP-a $\tilde{A}x = \tilde{\lambda}\tilde{B}x$ s realnim simetričnim pozitivno definitnim $\tilde{A}$ i $\tilde{B}$. Neymeyrova shema uključuje metode PINVIT-a, PSD-a i LOPCG-a iz prethodnog odjeljka. Mi ćemo razviti sličnu klasu metoda kao Neymerove i to za aproksimiranje unutarnjih svojstvenih vrijednosti oko definitnog intervala: $\lambda_1^+, \ldots, \lambda_{\ell_+}^+$ i $\lambda_1^-, \ldots, \lambda_{\ell_-}^-$ pozitivno definitnog matričnog para (A, B). U principu, prirodne brojeve ℓ_+, ℓ_- možemo proizvoljno odabrati, ali nama je cilj da oba broja ℓ_+ i ℓ_- budu mala (u jednostavnijim varijantama jedan od $\ell_\pm$ može biti jednak 0). U Algoritmu 3.2 je dana *indefinitna varijanta m-sheme s jednom matricom prekondicioniranja*.

U duhu Neymeyrove sheme [57, 58] dobivamo niz matrica

$$X^{(0)}, X^{(1)}, X^{(2)}, \ldots \in \mathbb{C}^{n\times k}, \qquad k = k_+ + k_-,\ k_+ \geq \ell_+,\ k_- \geq \ell_-, \tag{3.16}$$

kako slijedi. Neka je $m \geq 2$ mali fiksni prirodan broj. U i-toj iteraciji algoritma, promatramo potprostor

$$\mathcal{U}^{(i)} := \operatorname{span}\Big[X^{(i)}, W^{(i)}, X^{(i-1)}, \ldots, X^{(i-m+2)}\Big],$$

s *prekondicioniranom matricom reziduala*

$$W^{(i)} = T \cdot \Big(AX^{(i)} - BX^{(i)}\Theta^{(i)}\Big)$$

za neku hermitsku pozitivno definitnu *matricu prekondicioniranja* $T \in \mathbb{C}^{n\times n}$ i

$$\Theta^{(i)} := \Big((X^{(i)})^H BX^{(i)}\Big)^{-1}(X^{(i)})^H AX^{(i)}.$$

Algoritam 3.2 Indefinitna varijanta m-sheme s jednom matricom prekondicioniranja, $m \geq 2$

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: koeficijenti pozitivno definitnog para (A, B) s indefinitnom B;
$T \in \mathbb{C}^{n\times n}$: hermitska pozitivno definitna matrica prekondicioniranja;
$X^{(0)} \in \mathbb{C}^{n\times k}$: matrica početnih aproksimacija takva da $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}\Big((X^{(0)})^H BX^{(0)}\Big)$.

Izlaz: $\ell_+ \leq k_+$ najmanjih B-pozitivnih svojstvenih parova i $\ell_- \leq k_-$ najvećih B-negativnih svojstvenih parova.

B-ortonormirati $X^{(0)}$.
$(\Theta^{(0)}, Y^{(0)}) \leftarrow \mathrm{RR}(X^{(0)}, A, B)$.
$X^{(0)} \leftarrow X^{(0)}Y^{(0)}$.
Inicijalizacija: Ako je $m \geq 3$, tada izračunati inicijalni niz od $m-2$ matrice $X^{(1)}, \ldots, X^{(m-2)}$ izvršavajući jedan korak j-sheme s inicijalnim nizom $X^{(0)}, \ldots, X^{(j-2)}$ za $j = 2, \ldots, m-1$.
Iteracija:
za $i = m-2,\ m-1,\ m, \ \ldots$ **čini**
  $R^{(i)} = AX^{(i)} - BX^{(i)}\Theta^{(i)}$.
  (po izboru) Ukloniti deflacijom svojstvene vrijednosti.
  ako Ako su sve svojstvene vrijednosti konvergirale **tada**
    izaći iz petlje.
  kraj ako
  $W^{(i)} \leftarrow T(AX^{(i)} - BX^{(i)}\Theta^{(i)})$.
  $\mathcal{U}^{(i)} \leftarrow \mathrm{span}[U^{(i)}] = \mathrm{span}[X^{(i)}, W^{(i)}, X^{(i-1)}, \ldots, X^{(i-m+2)}]$.
  B-ortonormirati $U^{(i)}$.
  $(\Theta^{(i+1)}, Y^{(i+1)}) \leftarrow \mathrm{RR}(U^{(i)}, A, B)$.
  $X^{(i+1)} \leftarrow U^{(i)}Y^{(i+1)}$.
kraj za

Tada izabiremo $X^{(i+1)} \in \mathbb{C}^{n\times k}$ prema principu minimizacije traga (1.16), ali pod dodatnim uvjetom $\mathrm{span}\, X^{(i+1)} \subset \mathcal{U}^{(i)}$ (v. Korolar 1.24):

$$
\begin{aligned}
X^{(i+1)} \quad :=& \quad \underset{\substack{\mathrm{span}\, X \subset \mathcal{U}^{(i)} \\ X^H BX = J_k}}{\arg\min} \ \mathrm{tr}\,(X^H AX) \\
=& \quad \underset{\substack{X = UY,\ Y \in \mathbb{C}^{mk\times k} \\ X^H BX = J_k}}{\arg\min} \ \mathrm{tr}\,(X^H AX),
\end{aligned}
\tag{3.17}
$$

gdje je $U \in \mathbb{C}^{n\times mk}$ matrica bilo koje baze od $\mathcal{U}^{(i)}$, a J_k je kao u (3.4). Očito, (3.17) poprima konačnu vrijednost ako i samo ako $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}(U^H BU)$. Prema (3.5b), tada računamo $X^{(i+1)} = UY^{(i+1)}$ tako da $Y^{(i+1)} \in \mathbb{C}^{mk\times k}$ sadrži svojstvene vektore pridružene unutarnjim svojstvenim vrijednostima $\theta_1^+, \ldots, \theta_{k_+}^+, \theta_1^-, \ldots, \theta_{k_-}^-$ para $(U^H AU, U^H BU)$. Zapravo, provodimo Rayleigh-Ritzovu proceduru para (A, B) na potprostoru $\mathcal{U}^{(i)}$. Pretpostavljamo da su ti svojstveni vektori normirani tako da

$$\left(Y^{(i+1)}\right)^H \left(U^H BU\right) Y^{(i+1)} = J_k. \tag{3.18}$$

Uočimo da dimenzija od $\mathcal{U}^{(i)}$ nije veća od mk za sve $i = 0, 1, 2, \ldots$ Naime, iako teorijski biramo matrice punog ranga, tokom procesa računanja u aritmetici konačne preciznosti može se dogoditi da je dimenzija potprostora manja od predviđene. U tom slučaju gubitak dimenzije možemo nadoknaditi vektorima slučajnog smjera.

Gornja rasprava dovodi nas do Algoritma 3.2, naše prve varijante indefinitne m-sheme prekondicioniranih gradijentnih iteracija.

Algoritam 3.2 uklapa se u opći indefinitni algoritam u kojem je u i-tom koraku matrica baze $U^{(i)} = [X^{(i)}, W^{(i)}, X^{(i-1)}, \ldots, X^{(i-m+2)}]$, a Rayleigh-Ritzova procedura se izvršava Linijama 15 i 16. Kako su u ovom slučaju zadovoljeni uvjeti Leme 3.1, to je niz iteracijskih brojeva $\{\, \theta_j^{(i)\pm} \,\}$ za $1 \leq j \leq k_\pm$ konvergentan jer je monoton: B-pozitivne Ritzove vrijednosti su monotono padajuće, a B-negativne Ritzove vrijednosti su monotono rastuće, i ograničen sa svojstvenim vrijednostima para (A, B). Dakle, bez obzira na matricu prekondicioniranja, Algoritam 3.2 smanjuje trag funkcije iz (3.5a) i robustan je u izboru na matricu prekondicioniranja. Dakle, nije nužno da je matrica prekondicioniranja pozitivno definitna, iako ćemo to morati pretpostaviti za dokazivanje konvergencijskih svojstava.

Detalji oko same implementacije Algoritma 3.2 već su djelomično opisani u napomenama oko implementacije Algoritma 2.5. Napomene oko matrice početnih aproksimacija i B-ortonormalizacije iste su kao u Odjeljku 2.2.2. Kada postoje klasteri u spektru, od pomoći može biti korištenje k_+ i/ili k_- *strogo* većih od željenog broja svojstvenih vrijednosti, kao što je napomenuto npr. u [5].

Linije 15 i 16 Funkcija $RR(U, A, B)$ izvodi Rayleigh-Ritzovu proceduru na pozitivno definitnom komprimiranomom paru $(U^H AU, U^H BU)$ vraćajući $k_\pm$ svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora para $(U^H AU, U^H BU)$ kao što je već opisano u Odjeljku 2.2.2. Samo računanje svojstvenih parova para $(U^H AU, U^H BU)$, umjesto korištenja Veselićevog indefinitnog J-Jacobijevog algoritma na pomoćnom paru, može se provesti i Matlab-ovom funkcijom `eig`, a odgovarajuće predznake svojstvenih vrijednosti odrediti npr. provjerom je li odgovarajući svojstveni vektor $U^H BU$-pozitivan ili $U^H BU$-negativan. Kako je matrica $U^H BU$ indefinitna, a možda i $U^H AU$, moguće je da funkcija `eig` ne vrati realne svojstvene vrijednosti!

Linija 8 Kada je jednom Ritzov par konvergirao unutar zadane točnosti, potrebno ga je ukloniti iz procesa da se izbjegne nepotrebno daljnje računanje. U našem algoritmu, koristimo konzervativnu strategiju “deflacija iz sredine” : B-pozitivna Ritzova vrijednost θ_j^+ (ispuštamo eksponent (i) zbog preglednijeg zapisa) se uklanja deflacijom ako i samo su sve manje Ritzove vrijednosti θ_i^+, s $1 \leq i \leq j-1$, uklonjene deflacijom i[2]

$$\|r_j^+\|_2 = \|Ax_j^+ - \theta_j^+ Bx_j^+\|_2 \leq \mathsf{tol} \cdot |\theta_j^+| \, \|B\|_2 \|x_j^+\|_2, \tag{3.19}$$

gdje je $x_j^+ = Uy_j^+$ odgovarajući Ritzov vektor i tol je tolerancija koju definira korisnik. Ova strategija pomaže u isključivanju mogućnosti da smo deflacijom uklonili Ritzovu vrijednost koja aproksimira neželjenu svojstvenu vrijednost λ_ℓ^+ gdje $\ell > k_+$, iako se čini da se ovo jako rijetko događa u praksi. Analogan kriterij se koristi za B-negativne Ritzove vrijednosti. Deflacija se Ritzovih parova nastavlja na isti način kao npr. u standardnoj LOBPCG metodi [46]: Ritzovi vektori uklonjeni deflacijom ne sudjeluju u računanju $R^{(i)}$. Međutim, i dalje moraju biti uključeni u B-ortonormalizacijskom procesu radi izbjegavanja ponovljene konvergencije prema istoj svojstvenoj vrijednosti.

Linija 12 Prekondicionirani reziduali (ispuštamo eksponent (i) zbog preglednijeg zapisa) $w_j^\pm = Tr_j^\pm$, gdje su $r_j^\pm = Ax_j^\pm - \theta_j^\pm Bx_j^\pm$, dobiveni su rješavanjem linearnih sustava $T^{-1}w_j^\pm = r_j^\pm$ za $j = 1, \ldots, k_\pm$. Obično, ti se sustavi rješavaju samo približno s nekom iterativnom metodom, kao npr. s metodom linearnih konjugiranih gradijenata (s niskom tolerancijom) [22]. Koristimo hermitsku pozitivno definitnu matricu prekondicioniranja T iz tri razloga. Pošto želimo izračunati unutarnje svojstvene vrijednosti oko definitnog intervala, koristimo definitni pomak λ_0 za koji je matrica $A - \lambda_0 B$ pozitivno definitna, pa stoga koristimo hermitsku pozitivno definitnu matricu prekondicioniranja $T = (A - \lambda_0 B)^{-1}$ ili $T \approx (A - \lambda_0 B)^{-1}$. Drugi je razlog sama efikasnost simetričnih pozitivno definitnih matrica prekondicioniranja kao što su simetrični pozitivno definitni multigridni prekondicionari korišteni u diskretizaciji svojstvenog problema eliptičkih parcijalno diferencijalnih operatora. Treći razlog leži u činjenici da je konvergencijska analiza (v. Odjeljak 3.2.2) dostupna samo za simetrične pozitivno definitne matrice prekondicioniranja. Kako je naš Algoritam 3.2 robustan u odnosu na izbor matrice prekondicioniranja, također možemo koristiti pomak λ_0 izvan definitnog intervala, što rezultira korištenjem indefinitne matrice prekondicioniranja.

U Tablici 3.1 imenujemo metode za $m = 2$ i $m = 3$. Imena naših metoda su takva da upućuju na snažnu vezu s postojećim metodama za rješavanje djelomičnog generaliziranog svojstvenog problema para (A, B) s pozitivno definitnom B: PSD (PSA) stoji za engl. preconditioned steepest descent (ascent), tj. prekondicionirani najbrži spust (rast), LOPCG stoji za engl. locally optimal preconditioned conjugate gradient, tj. lokalno optimalni prekondicionirani konjugirani gradijent, B stoji za blok, tj. potprostornu verziju. Indefinitna LOBPCG metoda s jednom matricom prekondicioniranja [42, Algoritam 1]

[2]Iako koristimo eksponent $+$ $(-)$ kod reziduala r_j^+ (r_j^-) to ne znači da je r_j^+ (r_j^-) B-pozitivan (B-negativan); i slično za prekondicionirane reziduale $w_j^\pm$.

Tablica 3.1
Indefinitna varijanta m-sheme za $m = 2$ i $m = 3$.

m	ℓ_-	ℓ_+	Metoda	m	ℓ_-	ℓ_+	Metoda
2	1	0	PSA$^-$	2	0	1	PSD$^+$
2	> 1	0	BPSA$^-$	2	0	> 1	BPSD$^+$
3	1	0	indefinitni LOPCG$^-$	3	0	1	indefinitni LOPCG$^+$
3	> 1	0	indefinitni LOBPCG$^-$	3	0	> 1	indefinitni LOBPCG$^+$
2	1	1	indefinitni PSD/A	3	1	1	indefinitni LOPCG
2	> 1	> 1	indefinitni BPSD/A	3	> 1	> 1	indefinitni LOBPCG

podudara se s Algoritmom 3.2 za $m = 3$.

Indefinitna LOBPCG metoda

U Algoritmu 3.2 svojom efikasnošću posebno se ističe indefinitna LOBPCG metoda. Kod nje se potprostor izabire na sljedeći način

$$\mathcal{U}^{(i)} \leftarrow \operatorname{span}[U^{(i)}] = \operatorname{span}[X^{(i)}, W^{(i)}, X^{(i-1)}],$$

tj. novi potprostor je razapet stupcima trenutne iteracijske matrice, trenutne prekondicionirane matrice reziduala i prethodne iteracijske matrice. Numerički eksperimenti pokazuju da je dodavanje stupaca prethodne iteracijske matrice značajno ubrzanje nad indefinitnom BPSD/A metodom kod koje se potprostor izabire na sljedeći način

$$\mathcal{U}^{(i)} \leftarrow \operatorname{span}[U^{(i)}] = \operatorname{span}[X^{(i)}, W^{(i)}],$$

tj. novi potprostor je razapet stupcima trenutne iteracijske matrice i trenutne prekondicionirane matrice reziduala.

Zbog toga što $X^{(i-1)}$ i $X^{(i)}$ teže prema sadržavanju iste informacije kako i raste, matrica prirodne baze $\left[X^{(i)}, W^{(i)}, X^{(i-1)}\right]$ za $\mathcal{U}^{(i)}$ je višestruko loše kondicionirana. Da se izbjegne ovaj efekt, uzima se drugačija matrica baze: $\left[X^{(i)}, W^{(i)}, P^{(i)}\right]$, u biti kao što je predloženo za standardnu LOBPCG metodu [32, 40, 46]. U tu svrhu, neka je $3k \times k$ matrica $Y^{(i+1)}$ vraćena pomoću Rayleigh-Ritzove procedure podijeljena po blokovima

$$Y^{(i+1)} = \begin{bmatrix} Y_1^{(i+1)} \\ Y_2^{(i+1)} \end{bmatrix}, \quad Y_1^{(i+1)} \in \mathbb{C}^{k\times k}, \quad Y_2^{(i+1)} \in \mathbb{C}^{2k\times k},$$

i

$$U^{(i)} = [U_1^{(i)}, U_2^{(i)}], \quad U_1^{(i)} \in \mathbb{C}^{n\times k}, \quad U_2^{(i)} \in \mathbb{C}^{n\times 2k}.$$

Tada ažuriranje

$$P^{(i+1)} \leftarrow U_2^{(i)} Y_2^{(i+1)}, \qquad X^{(i+1)} \leftarrow U_1^{(i)} Y_1^{(i+1)} + P^{(i+1)}.$$

Algoritam 3.3 Indefinitna LOBPCG metoda s jednom matricom prekondicioniranja

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: koeficijenti pozitivno definitnog para (A, B) s indefinitnom B;
$T \in \mathbb{C}^{n\times n}$: hermitska pozitivno definitna matrica prekondicioniranja;
$X^{(0)} \in \mathbb{C}^{n\times k}$: matrica početnih aproksimacija takva da $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}\Big((X^{(0)})^H B X^{(0)}\Big)$.

Izlaz: $\ell_+ \leq k_+$ najmanjih B-pozitivnih svojstvenih parova i $\ell_- \leq k_-$ najvećih B-negativnih svojstvenih parova.

B-ortonormirati $X^{(0)}$.
$(\Theta^{(0)}, Y^{(0)}) \leftarrow \mathrm{RR}(X^{(0)}, A, B)$.
$X^{(0)} \leftarrow X^{(0)} Y^{(0)}$, $P^{(0)} \leftarrow []$.
za $i = 0, 1, \ldots$ **čini**
  $R^{(i)} = AX^{(i)} - BX^{(i)}\Theta^{(i)}$.
  (po izboru) Ukloniti deflacijom svojstvene vrijednosti.
  ako Ako su sve svojstvene vrijednosti konvergirale **tada**
    izaći iz petlje.
  kraj ako
  $W^{(i)} \leftarrow T \cdot R^{(i)}$.
  $U^{(i)} \leftarrow [X^{(i)}, W^{(i)}, P^{(i)}]$.
  B-ortonormirati $U^{(i)}$.
  $(\Theta^{(i+1)}, Y^{(i+1)}) \leftarrow \mathrm{RR}(U^{(i)}, A, B)$.
  $P^{(i+1)} \leftarrow U_2^{(i)} Y_2^{(i+1)}, \quad X^{(i+1)} \leftarrow U_1^{(i)} Y_1^{(i+1)} + P^{(i+1)}$.
kraj za

vodi do matrice baze koja — u egzaktnoj aritmetici — razapinje isti potprostor kao i prirodna baza. Uočimo da se na ovaj način koristi činjenica da se prvih k stupaca matrice $U^{(i)}$ (koji su već B-ortogonalni) ne mijenja u pažljivoj implementaciji B-ortogonalizacijskog procesa.

Indefinitna LOBPCG metoda s jednom matricom prekondicioniranja opisana je u Algoritmu 3.3.

Najjednostavnije varijante: PSD$^+$ i PSA$^-$

Sada ćemo razmotriti najjednostavnije varijante indefinitne m-sheme dane u Algoritmu 3.2: PSD$^+$ i PSA$^-$ metodu. Ukoliko je B pozitivno definitna tada PSD (PSA) računa aproksimaciju najmanje (najveće) svojstvene vrijednosti i odgovarajućeg svojstvenog vektora para (A, B). U našim metodama eksponent $\pm$ označava da se iteracije ne izvršavaju nad cijelim euklidskin prostorom, nego samo na B-pozitivnim ili B-negativnim potprostorima (ako je $B \succ 0$ tada je PSD = PSD$^+$; ako je $B \prec 0$ tada PSA = PSA$^-$). Dakle, ukoliko je B indefinitna, kao što je u našem slučaju, PSD$^+$ (PSA$^-$) računa aproksimaciju najmanje (najveće) B-pozitivne (B-negativne) svojstvene vrijednosti i odgovarajućeg svojstvenog vektora. Da bismo dali konvergencijske teoreme za naše metode PSD$^+$ i PSA$^-$ koristimo konvergencijski teorem izveden za PSD metodu [56] koja je dokazana samo za realne simetrične matrice. Stoga, samo u ovom pododjeljku pretpostavljamo da su A i B realne i simetrične.

Podsjetimo se Algoritma 3.2 i Tablice 3.1. Za $m = 2$ i-ti potprostor je razapet sa stupcima trenutne iterirajuće matrice $X^{(i)}$ i sa stupcima matrice trenutnog prekondicioniranog reziduala $W^{(i)} = TR^{(i)}$. Stoga se vektorska iteracija može zapisati na ekvivalentan način (zamjenjujući $X^{(i)}$ s $x_\pm$ te $X^{(i+1)}$ s $x'_\pm$):

$$(\mathrm{PSD}^+) \qquad x'_+ = x_+ - \tau_{opt}^+ T(Ax_+ - \rho(x_+)Bx_+) \tag{3.20a}$$

s optimalnom duljinom koraka

$$\tau_{opt}^+ = \arg\min_{\tau\in\mathbb{R}} \rho(x_+ - \tau\, T(Ax_+ - \rho(x_+)Bx_+)) \tag{3.20b}$$

i

$$(\mathrm{PSA}^-) \qquad x'_- = x_- - \tau_{opt}^- T(Ax_- - \rho(x_-)Bx_-) \tag{3.21a}$$

s optimalnom duljinom koraka

$$\tau_{opt}^- = \arg\max_{\tau\in\mathbb{R}} \rho(x_- - \tau\, T(Ax_- - \rho(x_-)Bx_-)) \tag{3.21b}$$

gdje

$$\rho(x) = \frac{x^T Ax}{x^T Bx}, \quad x^T Bx \neq 0 \tag{3.22}$$

označava Rayleighjev kvocijent pozitivno definitnog matričnog para (A, B), a simetrična pozitivno definitna matrica prekondicioniranja T aproksimira inverz pozitivno definitne matrice $A - \lambda_0 B$ za dani definitni pomak λ_0. Početni vektor aproksimacija za PSD^+ (PSA^-) mora biti B-pozitivan (B-negativan), a svaki sljedeći iteracijski vektor x'_+ (x'_-) se bira tako da bude B-pozitivan (B-negativan).

Napomena 3.4 Parametar τ_{opt}^+ u (3.20b) (τ_{opt}^- u (3.21b)) je implicitno dan primjenom Rayleigh-Ritzove procedure na dvodimenzionalan [3] potprostor

$$\mathcal{U}_1 := \mathrm{span}[x_+, T(Ax_+ - \rho(x_+)Bx_+)] \ (\mathcal{U}_2 := \mathrm{span}[x_-, T(Ax_- - \rho(x_-)Bx_-)]).$$

Ako $T(Ax_+ - \rho(x_+)Bx_+)$ ($T(Ax_- - \rho(x_-)Bx_-)$) nije svojstveni vektor, tada je $(x'_+, \rho(x'_+))$ ($(x'_-, \rho(x'_-))$) Ritzov par para (A, B) u odnosu na potprostor $\mathcal{U}_1$ ($\mathcal{U}_2$). Kako je cilj PSD$^+$ (PSA$^-$) minimizirati (maksimizirati) Rayleighov kvocijent $\rho(x)$ nad B-pozitivnim (B-negativnim) vektorima, $\rho(x'_+)$ ($\rho(x'_-)$) je, ukoliko imamo dvije vrijednosti istog B-predznaka, manja B-pozitivna (veća B-negativna) Ritzova vrijednost i x'_+ (x'_-) je pridružen Ritzov vektor. Ukoliko trenutni potprostor ne sadrži dva vektora istog B-predznaka,

[3]Ako su $x_\pm$ i $T(Ax_\pm - \rho(x_\pm)Bx_\pm)$ linearno zavisni tada iteracija završava s trenutnim iteracijskim vektorom $x_\pm$.

iteracija završava s trenutnim iteracijskim vektorom $x_\pm$. Novi iteracijski vektor $x'_\pm$ može (i preporučujemo to u praksi) biti B-normaliziran, tj. x'_+ (x'_-) izabiremo tako da $(x'_+)^T Bx'_+ = 1$ ($(x'_-)^T Bx'_- = -1$).

Napomena 3.5 Prisjetimo se Tablice 3.1. Indefinitna PSD/A metoda kombinira PSD$^+$ i PSA$^-$ metode u jednu iteracijsku metodu: koristi potprostor

$$\mathcal{U}^{(i)} := \operatorname{span}[X^{(i)}, W^{(i)}],\ i = 0, 1, 2, \ldots$$

gdje

$$X^{(i)} := [x_+, x_-]$$

sadrži aproksimacije željenih svojstvenih vektora koji odgovaraju λ_1^+ i λ_1^-, tim redom, a

$$W^{(i)} := [T(Ax_+ - \rho(x_+)Bx_+), T(Ax_- - \rho(x_-)Bx_-)]$$

je matrica prekondicioniranog reziduala trenutne iteracijske matrice $X^{(i)}$, za neku simetričnu pozitivno definitnu matricu $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Potprostor $\mathcal{U}^{(i)}$ u Algoritmu 3.2 s $m = 3$ i $\ell_\pm = 1$, tj. indefinitni LOPCG, dodatno sadrži $\operatorname{span} X^{(i-1)}$, tj. prostor stupaca prethodne iteracijske matrice, pa indefinitan PSD/A možemo smatrati skraćenom verzijom indefinitnog LOPCG-a. Slično, indefinitni BPSD/A se može interpretirati kao skraćena verzija indefinitnog LOBPCG-a. $\diamond$

Konvergencijski teoremi za PSD$^+$ i PSA$^-$

U [56] je dan konvergencijski teorem za standardnu PSD metodu primijenjenu na realni simetričan par $(\widetilde{A}, B)$ gdje je $\widetilde{A}$ pozitivno definitna (da bi se izračunala najmanja svojstvena vrijednost), koristeći dualni par $(B, \widetilde{A})$ (da bi se izračunala najveća svojstvena vrijednost). Da bismo dali odgovarajuće konvergencijske teoreme za Ritzove vrijednosti koje aproksimiraju svojstvene vrijednosti oko definitnog intervala pozitivno definitnog para (A, B) s indefinitnom B, izračunatih pomoću PSD$^+$ (3.20a), (3.20b) i PSA$^-$ (3.21a), (3.21b) moramo ih prikazati kao vanjske svojstvene vrijednosti nekog pomoćnog matričnog para.

Promotrimo GSP $Ax = \lambda Bx$ sa svojstvenim vrijednostima (3.1a),(3.1b). Neka je λ_0 *dani* definitni pomak i definirajmo

$$\widetilde{A} := A - \lambda_0 B \succ 0,\ \widetilde{\lambda} := \lambda - \lambda_0 \neq 0.$$

Stoga su za svojstveni problem

$$Bx = \tilde{\mu}\tilde{A}x \tag{3.23}$$

svojstvene vrijednosti $\{\tilde{\mu}\}$ dane s[4]

$$\tilde{\mu} = 1/\tilde{\lambda} = 1/(\lambda - \lambda_0)$$

i poredane na sljedeći način:

$$\begin{array}{ccccccccccccc} 1/\tilde{\lambda}_1^- & \leq & \cdots & \leq & 1/\tilde{\lambda}_{n_-}^- & < & 0 = 1/\tilde{\lambda}_1^\infty = \cdots = 1/\tilde{\lambda}_{n_0}^\infty & < & 1/\tilde{\lambda}_{n_+}^+ & \leq & \cdots & \leq & 1/\tilde{\lambda}_1^+ \\ \shortparallel & & & & \shortparallel & & & & \shortparallel & & & & \shortparallel \\ \tilde{\mu}_1^- & \leq & \cdots & \leq & \tilde{\mu}_{n_-}^- & < & 0 = \tilde{\mu}_1^\infty = \cdots = \tilde{\mu}_{n_0}^\infty & < & \tilde{\mu}_{n_+}^+ & \leq & \cdots & \leq & \tilde{\mu}_1^+ \end{array}.$$

Neka

$$\tilde{\mu}(x) = \frac{x^T B x}{x^T \tilde{A} x} = \frac{1}{\rho(x) - \lambda_0} \in \mathbb{R}, \quad x \neq 0 \tag{3.24}$$

označava Rayleighjev kvocijent para $(B, \widetilde{A})$ iz (3.23). Dakle, cilj PSD^+ je ekvivalentan računanju najveće svojstvene vrijednosti $\tilde{\mu}_1^+$ maksimizirajući $\tilde{\mu}(x)$ iz (3.24), dok je za PSA^- ekvivalentan računanju najmanje svojstvene vrijednosti $\tilde{\mu}_1^-$ minimizirajući $\tilde{\mu}(x)$ iz (3.24). Kako sada želimo izračunati vanjske svojstvene vrijednosti možemo koristiti prekondicioniranu iteraciju $\mathrm{PSD}_{\tilde{\mu}}$ (3.25a), (3.25b) i tada primijeniti [56, Teorem 2.2] na par $(B, \widetilde{A})$ i $(-B, \widetilde{A})$ iz (3.23), tim redom. Transformacija metode (3.14) (nakon množenja s $\tilde{\mu}(x) = 1/\tilde{\rho}(x)$, zamjenjujući $x^{(i+1)}$ s x', $x^{(i)}$ s x, $\tau^{(i)}$ s τ_{opt}) glasi

$$(\mathrm{PSD}_{\tilde{\mu}}) \qquad \tilde{\mu}(x)x' = \tilde{\mu}(x)x + \tau_{opt} T(Bx - \tilde{\mu}(x)\tilde{A}x) \tag{3.25a}$$

s optimalnom duljinom koraka

$$\tau_{opt} = \arg\max_{\tau \in \mathbb{R}} \tilde{\mu}(\tilde{\mu}(x)x + \tau T(Bx - \tilde{\mu}(x)\widetilde{A}x)). \tag{3.25b}$$

Za simetričnu pozitivno definitnu matricu prekondicioniranja T, koja aproksimira inverz pozitivno definitne $\widetilde{A}$ pretpostavljamo [56, Odjeljak 1.1]

$$||I - T\widetilde{A}||_{\widetilde{A}} \leq \gamma, \ \gamma \in [0, 1\rangle. \tag{3.26}$$

[56, Teorem 1.2] daje konvergencijsku ocjenu najslabije moguće konvergencije metode PSD. Ta je ocjena oštra u smislu da se može izabrati takav početni vektor i takva matrica prekondicioniranja T koja zadovoljava (3.26) da se ocjena dostigne. [56, Teorem 1.2] garantira monotonu konvergenciju Ritzovih vrijednosti prema nekoj svojstvenoj vrijednosti; i to najmanjoj samo ako je dostignut zadnji interval $[\lambda_1, \lambda_2\rangle$, no, zbog grešaka zaokruživanja, u praksi gotovo sigurno konvergira prema najmanjoj svojstvenoj vrijednosti. Sada izvodimo slične konvergencijske teoreme za naše metode PSD^+ i PSA^-, tim redom, kako slijedi.

Teorem 3.6 Neka su $x_+ \in \mathbb{R}^n$ i x_+' iteracijski vektori PSD^+ metode dobiveni pomoću (3.20a), (3.20b). Pretpostavljamo da matrica prekondicioniranja T zadovoljava (3.26).

[4]Stavljamo $1/\infty = 0$.

Rayleighjevi kvocijenti $\rho(x_+)$ su monotono padajući i konvergiraju prema B-pozitivnoj svojstvenoj vrijednosti, dok iteracijski vektori konvergiraju prema pridruženom B-pozitivnom svojstvenom vektoru.
Ako Rayleighjev kvocijent iteracijskog vektora x_+ zadovoljava $\lambda_i^+ \leq \rho(x_+) < \lambda_{i+1}^+$, $i = 1, \ldots, n_+ - 1$, tada Rayleighjev kvocijent sljedećeg iteracijskog vektora zadovoljava $\rho(x'_+) \leq \lambda_i^+$ ili se primijenjuje sljedeća ocjena

$$\begin{aligned} &\frac{\rho(x'_+) - \lambda_i^+}{\lambda_{i+1}^+ - \rho(x'_+)} \leq \sigma_{i,+}^2 \frac{\rho(x_+) - \lambda_i^+}{\lambda_{i+1}^+ - \rho(x_+)} \\ &\text{gdje} \quad \sigma_{i,+} = \frac{\kappa_{i,+} + \gamma(2 - \kappa_{i,+})}{(2 - \kappa_{i,+}) + \gamma\kappa_{i,+}} \quad \text{i} \quad \kappa_{i,+} = \frac{(\lambda_i^+ - \lambda_0)(\lambda_1^- - \lambda_{i+1}^+)}{(\lambda_{i+1}^+ - \lambda_0)(\lambda_1^- - \lambda_i^+)}. \end{aligned} \tag{3.27}$$

Ocjena je oštra i može se dostići kada $\rho(x_+) \to \lambda_i^+$ u trodimenzionalnom invarijantnom potprostoru pridruženom svojstvenim vrijednostima λ_i^+, λ_{i+1}^+ i λ_1^-.

Dokaz. Dokaz slijedi iz [56, Teorem 2.2] (primijenjen na par $(B, \widetilde{A})$ iz (3.23)) sa sljedećom supstitucijom $\mu(x) \to \tilde{\mu}(x_+) = 1/(\rho(x_+) - \lambda_0)$,
$(\mu_n, \mu_{i+1}, \mu_i, \mu_1) \to (\tilde{\mu}_1^-, \tilde{\mu}_{i+1}^+, \tilde{\mu}_i^+, \tilde{\mu}_1^+)$, $\mu_j \to \tilde{\mu}_j^\pm = 1/(\lambda_j^\pm - \lambda_0)$, $\sigma \to \sigma_{i,+}$ i $\kappa \to \kappa_{i,+}$. □

Teorem 3.7 Neka su $x_- \in \mathbb{R}^n$ i x'_- iteracijski vektori PSA^- metode dobiveni pomoću (3.21a), (3.21b). Pretpostavljamo da matrica prekondicioniranja T zadovoljava (3.26). Rayleighjevi kvocijenti $\rho(x_-)$ su monotono rastući i konvergiraju prema B-negativnoj svojstvenoj vrijednosti dok iteracijski vektori konvergiraju prema pridruženom B-negativnom svojstvenom vektoru.
Ako Rayleighjev kvocijent iteracijskog vektora x_- zadovoljava $\lambda_{i+1}^- < \rho(x_-) \leq \lambda_i^-$, $i = 1, \ldots, n_- - 1$, tada Rayleighjev kvocijent sljedećeg iteracijskog vektora zadovoljava $\rho(x'_-) \geq \lambda_i^-$ ili se primijenjuje sljedeća ocjena

$$\begin{aligned} &\frac{\lambda_i^- - \rho(x'_-)}{\rho(x'_-) - \lambda_{i+1}^-} \leq \sigma_{i,-}^2 \frac{\lambda_i^- - \rho(x_-)}{\rho(x_-) - \lambda_{i+1}^-} \\ &\text{gdje} \quad \sigma_{i,-} = \frac{\kappa_{i,-} + \gamma(2 - \kappa_{i,-})}{(2 - \kappa_{i,-}) + \gamma\kappa_{i,-}} \quad \text{i} \quad \kappa_{i,-} = \frac{(\lambda_i^- - \lambda_0)(\lambda_1^+ - \lambda_{i+1}^-)}{(\lambda_{i+1}^- - \lambda_0)(\lambda_1^+ - \lambda_i^-)}. \end{aligned} \tag{3.28}$$

Ocjena je oštra i može se dostići kada $\rho(x_-) \to \lambda_i^-$ u trodimenzionalnom invarijantnom potprostoru pridruženom svojstvenim vrijednostima λ_i^-, λ_{i+1}^- i λ_1^+.

Dokaz. Dokaz slijedi iz [56, Teorem 2.2] (primijenjen na par $(-B, \widetilde{A})$ iz (3.23)) sa sljedećom supstitucijom $\mu(x) \to -\tilde{\mu}(x_-) = -1/(\rho(x_-) - \lambda_0)$,
$(\mu_n, \mu_{i+1}, \mu_i, \mu_1) \to (-\tilde{\mu}_1^+, -\tilde{\mu}_{i+1}^-, -\tilde{\mu}_i^-, -\tilde{\mu}_1^-)$, $\mu_j \to -\tilde{\mu}_j^\pm = -1/(\lambda_j^\pm - \lambda_0)$, $\sigma \to \sigma_{i,-}$ i $\kappa \to \kappa_{i,-}$. □

Za κ iz [56, Teorem 2.2] vrijedi $\kappa \in [0, 1\rangle$. Stoga $\kappa_{i,\pm} \in [0, 1\rangle$. Kako je $\sigma_{i,+}$ ($\sigma_{i,-}$) monotono rastuća funkcija obje svoje varijable $\gamma, \kappa_{i,+} \in [0, 1\rangle$ ($\gamma, \kappa_{i,-} \in [0, 1)$), manji γ

(što znači da se matrica prekondicioniranja T približava egzaktnom inverzu matrice $\widetilde{A}$) i/ili manji $\kappa_{i,+}$ ($\kappa_{i,-}$) povlači bržu konvergenciju PSD^+ (PSA^-) metode.

Sada ćemo izvesti asimptotsku ocjenu za (3.27). Pretpostavljajući da vrijedi $\lambda_1^+ \leq \rho(x_+) < \lambda_2^+$ i (3.26), asimptotski, kada $\rho(x_+) \to \lambda_1^+$, imamo $(\lambda_2^+ - \rho(x'_+))/(\lambda_2^+ - \rho(x_+)) \to 1$ i stoga

$$\frac{\rho(x'_+) - \lambda_1^+}{\rho(x_+) - \lambda_1^+} \lesssim \sigma_+^2$$

$$\text{gdje} \quad \sigma_+ = \sigma_{1,+} = \frac{\kappa_+ + \gamma(2-\kappa_+)}{(2-\kappa_+) + \gamma\kappa_+} \quad \text{i} \quad \kappa_+ = \kappa_{1,+} = \frac{(\lambda_1^+ - \lambda_0)(\lambda_1^- - \lambda_2^+)}{(\lambda_2^+ - \lambda_0)(\lambda_1^- - \lambda_1^+)}.$$

Dakle, naša PSD^+ metoda konvergira barem linearno s asimptotskim konvergencijskim faktorom σ_+^2, koji ovisi o gap-u između λ_1^+ i λ_0 relativno u odnosu na gap između λ_2^+ i λ_0, i naravno o γ (kvalitativnoj mjeri matrice prekondicioniranja T). Ako $\lambda_2^+ \approx \lambda_1^+$ tada $\kappa_+ \approx 1$ što vodi do sporije konvergencije PSD^+ metode. Asimptotski, kada $\lambda_0 \to \lambda_1^+$ tada $\kappa_+ \to 0$ i stoga $\sigma_+ \to \gamma$.

Slični zaključi vrijede za (3.28). Pretpostavljajući da vrijedi $\lambda_2^- < \rho(x_-) \leq \lambda_1^-$ i (3.26), asimptotski, kada $\rho(x_-) \to \lambda_1^-$, imamo $(\rho(x'_-) - \lambda_2^-)/(\rho(x_-) - \lambda_2^-) \to 1$ i stoga

$$\frac{\lambda_1^- - \rho(x'_-)}{\lambda_1^- - \rho(x_-)} \lesssim \sigma_-^2$$

$$\text{gdje} \quad \sigma_- = \sigma_{1,-} = \frac{\kappa_- + \gamma(2-\kappa_-)}{(2-\kappa_-) + \gamma\kappa_-} \quad \text{i} \quad \kappa_- = \kappa_{1,-} = \frac{(\lambda_1^- - \lambda_0)(\lambda_1^+ - \lambda_2^-)}{(\lambda_2^- - \lambda_0)(\lambda_1^+ - \lambda_1^-)}.$$

Dakle, naša PSA^- metoda konvergira barem linearno s asimptotskim konvergencijskim faktorom σ_-^2, koji ovisi o gap-u između λ_1^- i λ_0 relativno u odnosu na gap između λ_2^- i λ_0, i naravno o γ (kvalitativnoj mjeri matrice prekondicioniranja T). Ako $\lambda_2^- \approx \lambda_1^-$ tada $\kappa_- \approx 1$ što vodi do sporije konvergencije PSA^- metode. Asimptotski, kada $\lambda_0 \to \lambda_1^-$ tada $\kappa_- \to 0$ i stoga $\sigma_- \to \gamma$.

Odgovarajući konvergencijski teoremi za blok metode BPSD$^+$ i BPSA$^-$ mogu se izvesti iz [61]. Za praktično važne (standardne i indefinitne) metode tipa LO(B)PCG još uvijek ne postoje oštre konvergencijske ocjene. Poznato je da konvergencijski teoremi dokazani za prekondicionirane inverzne iteracije (PINVIT) [59], PSD/A [56, 60, 61] mogu poslužiti samo kao gornje (ne-oštre) ocjene. To vrijedi i za naše konvergencijske ocjene (za indefinitan slučaj). Naime, svojstvo ispreplitanja svojstvenih vrijednosti povlači da je Ritzova vrijednost θ_1^+ (θ_1^-) izračunata Algoritmom 3.2 s $m = 3$ i $\ell_+ = 1, \ell_- = 0$ ($\ell_+ = 0, \ell_- = 1$) barem onoliko blizu λ_1^+ (λ_1^-) koliko je Ritzova vrijednost $\rho(x'_+)$ ($\rho(x'_-)$) izračunata s PSD$^+$ (PSA$^-$) (jer potprostor iz PSD$^+$ i/ili PSA$^-$ metode je sadržan u potprostoru Algoritma 3.2 s $m = 3$). Zbog toga, Algoritam 3.2 s $m = 3$ i $\ell_+ = 1, \ell_- = 0$ ($\ell_+ = 0, \ell_- = 1$) konvergira barem linearno s asimptotskim konvergencijskim faktorom σ_+^2 (σ_-^2).

Algoritam 3.4 Indefinitna varijanta m-sheme s dvije matrice prekondicioniranja, $m \geq 2$

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$: koeficijenti pozitivno definitnog para (A, B) s indefinitnom B;
$T_+, T_- \in \mathbb{C}^{n \times n}$: hermitske pozitivno definitne matrice prekondicioniranja;
$X^{(0)} \in \mathbb{C}^{n \times k}$: matrica početnih aproksimacija takva da $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}\Big((X^{(0)})^H B X^{(0)}\Big)$.

Izlaz: $\ell_+ \leq k_+$ najmanjih B-pozitivnih svojstvenih parova i $\ell_- \leq k_-$ najvećih B-negativnih svojstvenih parova.

B-ortonormirati $X^{(0)}$.
$(\Theta^{(0)}, Y^{(0)}) \leftarrow \mathrm{RR}(X^{(0)}, A, B)$.
$X^{(0)} \leftarrow X^{(0)} Y^{(0)}$.
Inicijalizacija: Ako je $m \geq 3$, tada izračunati inicijalni niz od $m-2$ matrice $X^{(1)}, \ldots, X^{(m-2)}$ izvršavajući jedan korak j-sheme s inicijalnim nizom $X^{(0)}, \ldots, X^{(j-2)}$ za $j = 2, \ldots, m-1$.
Iteracija:
za $i = m-2,\ m-1,\ m,\ \ldots$ **čini**
  $R^{(i)} = AX^{(i)} - BX^{(i)}\Theta^{(i)}$.
  (po izboru) Deflacijom ukloniti konvergirane svojstvene vrijednosti.
  ako Ako su sve svojstvene vrijednosti konvergirale **tada**
    izaći iz petlje.
  kraj ako
  $W_+^{(i)} \leftarrow T_+ \cdot R_+^{(i)}$, $W_-^{(i)} \leftarrow T_- \cdot R_-^{(i)}$.
  $\mathcal{U}^{(i)} \leftarrow \mathrm{span}[U^{(i)}] = \mathrm{span}[X^{(i)}, W_+^{(i)}, W_-^{(i)}, X^{(i-1)}, \ldots, X^{(i-m+2)}]$.
  B-ortonormirati $U^{(i)}$.
  $(\Theta^{(i+1)}, Y^{(i+1)}) \leftarrow \mathrm{RR}(U^{(i)}, A, B)$.
  $X^{(i+1)} \leftarrow U^{(i)} Y^{(i+1)}$.
kraj za

3.2.3 Indefinitna varijanta m-sheme s dvije matrice prekondicioniranja

Konvergencija Algoritma 3.2 snažno ovisi o dobrom izboru matrice prekondicioniranja T, posebno u prisustvu klastera svojstvenih vrijednosti. Analiza Odjeljka 3.2.2 predlaže da izabiranje $T_+ \approx (A - \lambda_0^+ B)^{-1}$ s definitnim pomakom λ_0^+ blizu λ_1^+ vodi do konvergencije prema najmanjoj B-pozitivnoj svojstvenoj vrijednosti. Slično, matrica prekondicioniranja $T_- \approx (A - \lambda_0^- B)^{-1}$ s definitnim pomakom λ_0^- blizu λ_1^- je pogodna za najveću B-negativnu svojstvenu vrijednost. Međutim, teško je naći definitni pomak koji jednako dobro služi za aproksimiranje oba skupa svojstvenih vrijednosti. Jednostavna dosjetka tomu je izvršiti Algoritam 3.2 dva puta s dvije različite matrice prekondicioniranja T_+ i T_-; jedno se izvršenje fokusira na B-pozitivne svojstvene vrijednosti, a drugo se izvršenje fokusira na B-negativne svojstvene vrijednosti.

Međutim, postoji elegantnije rješenje. Možemo jednostavno uključiti obje matrice prekondicioniranog reziduala u potprostor:

$$\mathrm{span}\Big[X^{(i)}, T_+R^{(i)}, T_-R^{(i)}, X^{(i-1)}, \ldots, X^{(i-m+2)}\Big],$$

Algoritam 3.5 Indefinitna LOBPCG metoda s dvije matrice prekondicioniranja

Ulaz: A, $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$: koeficijenti pozitivno definitnog para (A, B) s indefinitnom B;
$T_+, T_- \in \mathbb{C}^{n\times n}$: hermitske pozitivno definitne matrice prekondicioniranja;
$X^{(0)} \in \mathbb{C}^{n\times k}$: matrica početnih aproksimacija takva da $(k_+, k_-, 0) \leq \mathsf{In}\Big((X^{(0)})^H B X^{(0)}\Big)$.
Izlaz: $\ell_+ \leq k_+$ najmanjih B-pozitivnih svojstvenih parova i $\ell_- \leq k_-$ najvećih B-negativnih svojstvenih parova.

B-ortonormirati $X^{(0)}$.
$(\Theta^{(0)}, Y^{(0)}) \leftarrow \mathrm{RR}(X^{(0)}, A, B)$.
$X^{(0)} \leftarrow X^{(0)}Y^{(0)}$, $P^{(0)} \leftarrow []$.
za $i = 0, 1, \ldots$ **čini**
  $R^{(i)} = AX^{(i)} - BX^{(i)}\Theta^{(i)}$.
  (po izboru) Ukloniti deflacijom svojstvene vrijednosti.
  ako Ako su sve svojstvene vrijednosti konvergirale **tada**
    izaći iz petlje.
  kraj ako
  $W_+^{(i)} \leftarrow T_+ \cdot R_+^{(i)}$, $W_-^{(i)} \leftarrow T_- \cdot R_-^{(i)}$.
  $U^{(i)} \leftarrow [X^{(i)}, W^{(i)}, P^{(i)}]$.
  B-ortonormirati $U^{(i)}$.
  $(\Theta^{(i+1)}, Y^{(i+1)}) \leftarrow \mathrm{RR}(U^{(i)}, A, B)$.
  $P^{(i+1)} \leftarrow U_2^{(i)} Y_2^{(i+1)}, \quad X^{(i+1)} \leftarrow U_1^{(i)} Y_1^{(i+1)} + P^{(i+1)}$.
kraj za

gdje $R^{(i)} = AX^{(i)} - BX^{(i)}\Theta^{(i)}$. Ovo povećava dimenziju potprostora. Da se to izbjegne, razdvajamo matricu reziduala na dva dijela: R_+ i R_- pridružene B-pozitivnim Ritzovim vrijednostima i B-negativnim Ritzovim vrijednostima, tim redom. Stavljajuću u fokus djelovanje matrice prekondicioniranja, ima smisla primijeniti T_+ samo na R_+ i T_- samo na R_-. Ova ideja vodi do potprostora:

$$\mathrm{span}\Big[X^{(i)}, T_+R_+^{(i)}, T_-R_-^{(i)}, X^{(i-1)}, \ldots, X^{(i-m+2)}\Big].$$

Indefinitna varijanta m-sheme s dvije matrice prekondicioniranja vodi do Algoritma 3.4. Rasprava Odjeljka 3.2.2 oko implementacijskih detalja Algoritma 3.2 proširuje se direktno na Algoritam 3.4. Također, nazivi metoda iz Tablice 3.1 vrijede i za Algoritam 3.4. Zbog svoje važnosti, i zbog drugačijeg računanja matrice baze, u Algoritmu 3.5 je opisana indefinitna LOBPCG metoda s dvije matrice prekondicioniranja koja se podudara s [42, Algoritam 2].

Napomena 3.8 Dajemo ideju kako doći do definitnih pomaka $\lambda_0^{\pm}$. Neka je zadan pozitivno definitan par (A, B). Primjenom algoritma ispitivanja potprostora, Algoritam 2.5 vraća jedan definitni pomak λ_0. Neka su $\theta_1^{(i)+}$, $i = 0, 1, 2, \ldots$ Ritzove vrijednosti dobivene Algoritmom 3.2 s definitnom pomakom λ_0, a koje aproksimiraju najmanju B-pozitivnu svojstvenu vrijednosti λ_1^+. Kako je $\lambda_1^+ \leq \theta_1^{(i+1)+} \leq \theta_1^{(i)+}$, $i = 0, 1, 2, \ldots$ to je razmak $\nu_{i+1} := \theta_1^{(i)+} - \theta_1^{(i+1)+}$ nenegativan. Zbog toga što $\nu_i \to 0$ za $i \to +\infty$, dvostruki korak (usp. [62, Algoritam 2])

$$\delta_{i+1}^{+} := \theta_1^{(i)+} - 2\nu_{i+1} = 2\theta_1^{(i+1)+} - \theta_1^{(i)+}$$

će jednom upasti u definitan interval para (A, B). Stoga nakon određene konvergencije Ritzovih vrijednosti $\theta_1^{(i)+}$, možemo provjeriti pozitivnu definitnost matrice $A - \delta_{i+1}^{+} B$; ukoliko je pozitivna definitnost potvrđena, dobili smo novi definitni pomak δ_{i+1}^{+}. Ukoliko je $\lambda_0 < \delta_{i+1}^{+}$ prelazimo na Algoritam 3.4, ali s novim definitnom pomakom $\lambda_0^{+} := \delta_{i+1}^{+}$ i starim $\lambda_0^{-} := \lambda_0$. Slično napravimo i za Ritzove vrijednosti $\theta_1^{(i)-}$ dobivajući novi definitni pomak δ_{i+1}^{-} (ali ne nužno za isti indeks (i)). Ukoliko je $\delta_{i+1}^{-} < \lambda_0$ prelazimo na Algoritam 3.4, ali s novim definitnom pomakom $\lambda_0^{-} := \delta_{i+1}^{-}$ i već promijenjenim $\lambda_0^{+} := \delta_{i+1}^{+}$.

3.2.4 Ocjena pogreške u izračunu svojstvenih vrijednosti

Završenjem naših algoritama, dobiveni Ritzovi parovi zadovoljavaju ocjenu (3.19) za normu njihovih reziduala. Koristeći perturbacijsku analizu, može se tada izvesti ocjena za točnost izračunatih svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora. Takva se perturbacijska analiza za definitne matrične parove može naći npr. u [79, 81].

Radi ilustracije jedne takve perturbacijske ocjene, promotrimo Ritzov par $(\hat{\lambda}, \hat{x})$ te pridruženi rezidualni vektor $r = A\hat{x} - \hat{\lambda}B\hat{x}$. Tada možemo konstruirati pogreške unazad $\Delta A, \Delta B$ takve da je $(\hat{\lambda}, \hat{x})$ egzaktan svojstveni par od $(A + \Delta A, B + \Delta B)$. Za dovoljno malu $\|r\|_2$, ovaj perturbirani par ostaje pozitivno definitan te vrijedi

$$|\hat{\lambda} - \lambda| \leq 2\left|\frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_1^{+} - \lambda_1^{-}}\right| \cdot \frac{\|r\|_2}{\|\hat{x}\|_2}, \tag{3.29}$$

gdje $\lambda_0 = (\lambda_1^{+} + \lambda_1^{-})/2$. Ova se ocjena može procijeniti kada su dobivene dovoljno dobre aproksimacije za $\lambda_1^{\pm}$.

Ocjena (3.29) je izvedena primjenom Weyleve nejednakosti na ekvivalentan hermitski svojstveni problem. Slično, Temple-Katov tip kvadratne rezidualne ocjene izvodi se iz [64, Teorem. 11.7.1]:

$$|\hat{\lambda} - \lambda| \leq \frac{4}{\operatorname{gap}(\hat{\lambda})(\lambda_1^{+} - \lambda_1^{-})} \cdot \left|\frac{\lambda - \lambda_0}{\hat{\lambda} - \lambda_0}\right| \cdot \frac{\|r\|_2^2}{\|\hat{x}\|_2^2}, \tag{3.30}$$

gdje

$$\operatorname{gap}(\hat{\lambda}) = \inf\left\{\left|(\hat{\lambda} - \lambda_0)^{-1} - (\lambda - \lambda_0)^{-1}\right| : \ \lambda \text{ je svojstvena vrijednost od } (A, B)\right\}.$$

Koristeći tehnike iz [52, 78], rezidualne ocjene se mogu proširiti na slučaj kada se određuje svojstveni potprostor.

3.2.5 Numerički eksperimenti

U sva tri eksperimenta želimo izračunati $k_+ = 3$ najmanja B-pozitivna i $k_- = 3$ najveća B-negativna svojstvena para danog pozitivno definitnog matričnog para (A, B) u kojemu su obje matrice indefinitne. U prva dva eksperimenta uspoređujemo indefinitnu LOBPCG metodu s jednom i s dvije matrice prekondicioniranja, tj. Algoritam 3.3 i Algoritam 3.5, tim redom; dok u trećem eksperimentu uspoređujemo indefinitnu BPSD/A metodu s indefinitnom LOBPCG metodom s dvije matrice prekondicioniranja, tj. Algoritam 3.4 s $m = 2$ i Algoritam 3.5, tim redom. Indefinitna BPSD/A metoda u svakoj iteraciji treba riješiti GSP reda $2k$ (ovdje je $k = 6$) dok indefinitna LOBPCG metoda treba pohraniti prethodnu iteracijsku matricu $X^{(i-1)}$ za i-tu iteraciju i riješiti GSP reda $3k$ u svakoj iteraciji. Koristimo $\mathsf{tol} = 10^{-7}$ u (3.19) u svim eksperimentima.

Eksperiment 3.9 ([42, Primjer 5.2]) Promotrimo jedan primjer skaliranog kvadratnog svojstvenog problema gdje su matrice $M, C, K \in \mathbb{R}^{n\times n}$ dane s

$$K = (n+1)^2 \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad M = I_n, \quad C = 2K. \tag{3.31}$$

Tada je KSP hiperbolan te su mu svojstvene vrijednosti dane s

$$\lambda_j^{\pm} = -\alpha_j \pm \sqrt{\alpha_j^2 - \alpha_j}, \quad \text{gdje} \quad \alpha_j = 4(n+1)^2 \sin^2 \frac{j\pi}{2(n+1)}, \tag{3.32}$$

za $j = 1, \dots, n$. Kako n raste, definitni interval pozitivno definitnog para (A, B) konvergira prema otprilike $(-19.2258, -0.5134)$ gdje je (A, B) linearizacijski matrični par oblika (1.21), tj.

$$A = \begin{bmatrix} M & \\ & -K \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} & M \\ M & C \end{bmatrix}.$$

Poznato je da su numerički algoritmi koji se primjenjuju na linearizacijski par KSP-a osjetljivi na skaliranje koeficijenata [27], a naši algoritmi nisu iznimka. Uočavajući da je $\|C\|_2 = 2\|K\|_2 = O(n^2)$, dok $\|M\|_2 = 1$, predlažemo reskaliranje para (A, B) kako slijedi:

$$A \leftarrow \begin{bmatrix} I & \\ & \frac{1}{n+1} I \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} I & \\ & \frac{1}{n+1} I \end{bmatrix}, \quad B \leftarrow \begin{bmatrix} I & \\ & \frac{1}{n+1} I \end{bmatrix} B \begin{bmatrix} I & \\ & \frac{1}{n+1} I \end{bmatrix}.$$

Koristimo matrice prekondicioniranja

$$T_0 = (A - \lambda_0 B)^{-1}, \qquad T_1^{\pm} = (A - \lambda_0^{\pm} B)^{-1}, \tag{3.33}$$

Tablica 3.2
KSP iz Eksp. 3.9 s egzaktnom inverznom matricom prekondicioniranja.

metoda	$k_+ = k_-$	$n = 1000$ #(iter) B-poz.	$n = 1000$ #(iter) B-neg.	$n = 2000$ #(iter) B-poz.	$n = 2000$ #(iter) B-neg.
Algoritam 3.3 s $T = T_0$	3	198	36	121	25
	4	137	28	184	27
	5	173	22	178	24
Algoritam 3.5 s $T_\pm = T_1^\pm$	3	14	21	11	16
	4	11	15	14	19
	5	11	17	11	15
Algoritam 3.5 s $T_\pm = T_2^\pm$	3	12	20	10	17
	4	14	20	10	18
	5	10	16	8	15

Tablica 3.3
KSP iz Eksp. 3.9 s AMG matricom prekondicioniranja.

metoda	$k_+ = k_-$	$n = 1000$ #(iter) B-poz.	$n = 1000$ #(iter) B-neg.	$n = 2000$ #(iter) B-poz.	$n = 2000$ #(iter) B-neg.
Algoritam 3.3 s $T = T_0$	3	215	45	198	45
	4	185	40	214	39
	5	182	37	188	36
Algoritam 3.5 s $T_\pm = T_1^\pm$	3	19	26	20	18
	4	18	23	20	25
	5	19	24	16	23

gdje je $\lambda_0 = -9$ jedan razuman izbor skoro u sredini definitnog intervala, dok su $\lambda_0^+ = -0.514$ i $\lambda_0^- = -19.22$ vrlo blizu njegovih rubova. Pripadne linearne sustave rješavamo koristeći Matlab-ov backslash operator. Želimo izračunati $\lambda_j^\pm$ za $j = 1, \ldots, 3$, tj. $\ell_+ = \ell_- = 3$ u Algoritmima 3.3 i 3.5. Dobiveni rezultati prikazani su u Tablici 3.2. Uočimo da smo dali ukupan broj iteracija potrebnih za konvergenciju svih B-pozitivnih i svih B-negativnih svojstvenih vrijednosti odvojeno. Na primjer, koristeći Algoritam 3.3 sa $k_+ = k_- = 3$ i $n = 1000$ sve željene B-negativne svojstvene vrijednosti su konvergirale već nakon 36 iteracija, dok je bilo potrebno ukupno 198 iteracija dok nisu konvergirale i željene B-pozitivn svojstvene vrijednosti. Ova velika razlika je uzrokovana činjenicom što su B-pozitivne svojstvene vrijednosti jako klasterirane. Tek kada koristimo Algoritam 3.5 s dobrim matricama prekondicioniranja $T_1^\pm$, taj efekt nestaje.

Možemo uvidjeti da se broj iteracija ne mijenja značajno kada poduplamo n. Ovo opažanje vrijedi i kada egzaktne inverze u (3.33) zamijenimo s algebarskim multigridnim (AMG) V-ciklusnim matricama prekondicioniranja: rezultati su dani u Tablici 3.3. U ovu svrhu, koristili smo implementaciju `HSL_MI20` [34] s pretpostavljenim vrijednostima.

Zanimljivo je uočiti što se događa kada izaberemo $T_2^\pm = (A - \lambda_i^\pm B)^{-1}$ s pomacima

$\lambda_\mathrm{i}^+ = -0.51$ and $\lambda_\mathrm{i}^- = -20$, koji su oba *izvan* definitnog intervala. Stoga je $T_2^\pm$ indefinitna i pretpostavke konvergencijske analize u Odjeljku 3.2.2 ne vrijede. Unatoč tome, Tablica 3.2 jasno pokazuje da se konvergencijsko ponašanje Algoritma 3.5 malo mijenja kada se pozitivno definitna matrica prekondicioniranja $T_1^\pm$ zamjeni s indefinitnom $T_2^\pm$. O upotrebi indefinitnih matrica prekondicioniranja već je raspravljano u [40] za standardnu LOBPCG metodu.

Na kraju, napominjemo da $k_\pm > \ell_\pm$ *može*, ali ne mora nužno imati pozitivan utjecaj na konvergenciju: vidjeti Tablice 3.2 i 3.3.

Eksperiment 3.10 ([42, Primjer 5.3]) Na osnovi konvergencijske analize u Odjeljku 3.2.2, očekujemo da će naši algoritmi biti manje efikasni ukoliko su razmaci između željenih svojstvenih vrijednosti i ostatka spektra jako mali. Primjer `spring` iz kolekcije NLEVP [7] je primjer takvog problema. To je hiperbolan KSP koji smo razmatrali u Eksperimentu 2.19. Sjetimo se matrice M, C, K su dane s

$$K = \begin{bmatrix} 15 & -5 & & \\ -5 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -5 \\ & & -5 & 15 \end{bmatrix}, \quad M = I_n, \quad C = 2K,$$

koristimo linearizaciju oblika (1.21), tj.

$$A = \begin{bmatrix} M & \\ & -K \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} & M \\ M & C \end{bmatrix}.$$

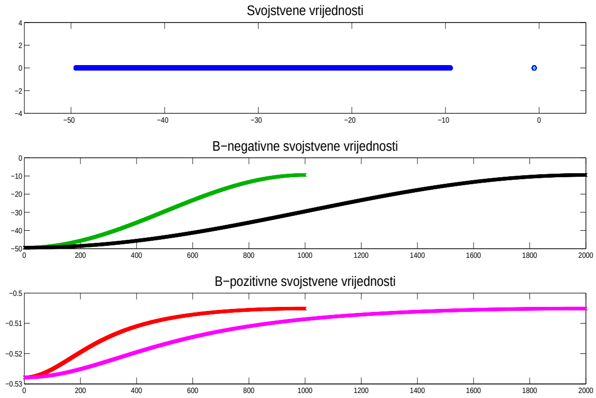
Sjetimo se, kako n raste definitni interval para (A, B) konvergira otprilike prema $(-9.472, -0.527)$. Štoviše, razmaci između svojstvenih vrijednosti postaju proizvoljno mali kada $n \to \infty$, vidjeti Sliku 3.1.

Koristimo matrice prekondicioniranja

$$T_0 = (A - \lambda_0 B)^{-1}, \qquad T_1^\pm = (A - \lambda_0^\pm B)^{-1}, \tag{3.34}$$

gdje je $\lambda_0 = -5$ skoro u sredini definitnog intervala, dok su $\lambda_0^+ = -0.528$ i $\lambda_0^- = -9.47$ vrlo blizu njegovih rubova. Želimo izračunati $\lambda_j^\pm$ za $j = 1, \dots, 3$, tj. $\ell_+ = \ell_- = 3$ u Algoritmima 3.3 i 3.5. Dobiveni rezultati nalaze se u Tablici 3.4. Možemo uočiti potpunu nedjelotvornost matrice prekondicioniranja T_0. Čak, štoviše, djelotvornost odličnih matrica prekondicioniranja $T_1^\pm$ se pogoršava kada n raste, zbog smanjivanja razmaka između svojstvenih vrijednosti. Svojstvene vrijednosti (v. eksplicitnu formulu (2.22)) za $n = 2000$:

$$\lambda_3^- \approx -9.472358489880460,$$
$$\lambda_2^- \approx -9.472234859496908,$$



Slika 3.1: Svojstvene vrijednosti iz Eksp. 3.10 za $n = 1000$ i $n = 2000$. Definitni interval para (A, B), kako n raste, je otprilike $\langle -9.472137, -0.527864\rangle$. B-negativne svojstvene vrijednosti su u intervalu oko $\langle 49.4948, -9.4721\rangle$ dok su B-pozitivne svojstvene vrijednosti u intervalu oko $\langle -0.5279, -0.5051\rangle$.

$$\lambda_1^- \approx -9.472160681139787,$$
$$\lambda_1^+ \approx -0.5278639682106362,$$
$$\lambda_2^+ \approx -0.5278637378440200,$$
$$\lambda_3^+ \approx -0.5278633539087816.$$

Tablica 3.4
KSP iz Eksp. 3.10 s egzaktnom inverznom matricom prekondicioniranja.

metoda	$k_+ = k_-$	$n = 1000$ #(iter) B-poz.	$n = 1000$ #(iter) B-neg.	$n = 2000$ #(iter) B-poz.	$n = 2000$ #(iter) B-neg.
Algoritam 3.3 s $T = T_0$	3	> 1500	544	> 1500	974
	4	> 1500	526	> 1500	960
	5	> 1500	513	> 1500	1167
Algoritam 3.5 s $T_\pm = T_1^\pm$	3	37	10	74	17
	4	27	9	65	15
	5	24	9	53	15

Eksperiment 3.11 Promotrimo isti KSP kao u Eksperimentu 3.10 i isti linearizacijski matrični par. Koristimo egzaktne matrice prekondicioniranja $T_\pm = (A - \lambda_0^\pm B)^{-1}$, gdje $\lambda_0^- = -9.47$ i $\lambda_0^+ = -0.528$ ($\lambda_0^+ = -0.5279$). Koristimo indefinitne varijante m-sheme s dvije matrice prekondicioniranja, tj. Algoritam 3.4 s $m = 2$ (indefinitni BPSD/A) i Algoritam 3.5 (indefinitni LOBPCG). Želimo izračunati $\lambda_j^\pm$ za $j = 1, 2, 3$. U Tablici 3.5 je dana usporedba između indefinitne BPSD/A i indefinitne LOBPCG metode za $n = 1000$ (koristeći dvije matrice prekondicioniranja i $k_\pm = \ell_\pm = 3$). Navodimo potreban broj iteracija

za konvergenciju svakog pojedinog B-negativnog i B-pozitivnog svojstvenog para. Također dajemo vremena izvršavanja. Pošto su u ovom primjeru B-pozitivne svojstvene vrijednosti više klasterirane nego što su B-negativne i jednoj i drugoj metodi treba mnogo više iteracija za izračun B-pozitivnih svojstvenih parova u odnosu na računanje B-negativnih.

Tablica 3.5

KSP iz Eksp. 3.11 s $n = 1000$. Usporedba, u ukupnom broju iteracija potrebnih da bi svaki željeni svojstveni par konvregirao, dana je za indefinitnu BPSD/A i indefinitnu LOBPCG metodu s $k_\pm = \ell_\pm = 3$ s dvije egzaktne matrice prekondicioniranja dobivenih korištenjem pomaka $\lambda_0^- = -9.47$ i $\lambda_0^+ = -0.528$ $(\lambda_0^+ = -0.5279)$. Zadnji stupac sadrži ukupno vrijeme izvršavanja metoda.

Metoda	λ_3^-	λ_2^-	λ_1^-	λ_1^+	λ_2^+	λ_3^+	CPU vrijeme
indefinitni BPSD/A	23	16	13	118 (40)	142 (49)	208 (73)	5.8 (2.3)
indefinitni LOBPCG	11	10	9	32 (16)	33 (18)	40 (20)	1.3 (0.7)

Rezultati prikazani u Tablici 3.5 pokazuju da je indefinitna LOBPCG metoda znatno brža od indefinitne BPSD/A metode i da korištenje pomaka λ_0^+ koji je već jako dobra aproksimacija svojstvene vrijednosti λ_1^+ (usp. [64, Odjeljak 4.3]) ubrzava konvergenciju obje metode (kao što je naznačeno u Odjeljku 3.2.2).

3.3 Primjena na produktni svojstveni problem

Prisjetimo se Odjeljka 1.2.6. U ovom potpoglavlju primijenjujemo naše indefinitne algoritme da bismo izračunali ℓ najmanjih svojstvenih vrijednosti matričnog produkta KM za dane hermitske pozitivno definitne $K, M \in \mathbb{C}^{m\times m}$. To je ekvivalentno računanju svojstvenih vrijednosti oko nule matričnog para (A, B) gdje

$$A = \begin{bmatrix} K & 0 \\ 0 & M \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix}. \tag{3.35}$$

Naime, λ^2 je svojstvena vrijednost matrice KM ako i samo ako su $\pm\lambda$ svojstvene vrijednosti para (A, B). Štoviše, odgovarajući svojstveni vektori para (A, B) su dani s

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} x \\ -y \end{bmatrix}, \tag{3.36}$$

gdje su x i y svojstveni vektori od MK i KM, tim redom, koji pripadaju λ^2.

Kako je par (A, B) iz (3.35) pozitivno definitan s indefinitnom B, možemo direktno primijeniti Algoritam 3.1 ili Algoritam 3.2. Međutim, možemo reorganizirati te algoritme da reflektiraju strukturu (3.36) svojstvenih vektora i tako reducirati numerički trošak. Kako to napraviti je ilustrirano u tekstu koji slijedi [42, Odjeljak 4].

Minimizacija traga. Zbog simetrije svojstvenih vrijednosti, princip minimizacije traga (1.16) primijenjen na par iz (3.35) glasi

$$\min_{\substack{Z\in\mathbb{C}^{2m\times k}\\ Z^H BZ=J_k}} \operatorname{tr}(Z^H AZ) = \sum_{i=1}^{k_+} \lambda_i^+ - \sum_{j=1}^{k_+} \lambda_j^- = 2\sum_{i=1}^{k_+} \lambda_i^+, \tag{3.37}$$

gdje $k = 2k_+$ i $\lambda_1^+, \ldots, \lambda_{k_+}^+$ su najmanje pozitivne svojstvene vrijednosti para (A, B). Zbog simetrije (3.36) svojstvenih vektora, minimizirajuća matrica Z_* se može izabrati kao

$$Z_* = \begin{bmatrix} X_* & X_* \\ Y_* & -Y_* \end{bmatrix}. \tag{3.38}$$

Stoga, možemo dodatno zahtjevati da matrica Z u (3.37) ima istu blok strukturu. Uvjet B-ortogonalnosti $Z^H BZ = J_k$ tada postaje $X^H Y = \frac{1}{2} I_{k_+}$ za blokove X, Y od Z. Dakle, dolazimo do principa minimizacije traga oblika

$$2\sum_{i=1}^{k_+} \lambda_i^+ = \min_{X^H Y=\frac{1}{2}I_{k_+}} 2\operatorname{tr}(X^H KX + Y^H MY) = \min_{X^H Y=I_{k_+}} \operatorname{tr}(X^H KX + Y^H MY). \tag{3.39}$$

A to je identično minimizacijskom principu u [47], [4, Teorem 3.2], iz kojega su izvedeni algoritmi CG tipa: 4DBSD u [67] i LOB4DPCG u [5]. Slično razmatranje je provedeno u [4, Napomena A.1]. Ovo već jako ukazuje da se 4DBSD i LOBP4DCG mogu smatrati kao specijalan slučaj našeg Algoritma 3.4 primijenjenog na (3.35). Da bismo to doista i zaključili, moramo nametnuti dodatne zahtjeve i na matricu početnih aproksimacija i na matricu prekondicioniranja u Algoritmu 3.4.

Matrica početnih aproksimacija. Zbog (3.38), razumno je izabrati matricu početnih aproksimacija koja ima istu blok strukturu. Npr.

$$\begin{bmatrix} X^{(0)} & X^{(0)} \\ Y^{(0)} & -Y^{(0)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{k_+} & E_{k_+} \\ E_{k_+} & -E_{k_+} \end{bmatrix} \tag{3.40}$$

je valjana matrica početnih aproksimacija, gdje $E_{k_+} = [e_1, \ldots, e_{k_+}]$ sadrži prvih k_+ stupaca od I_m.

Matrica prekondicioniranja. Za dane aproksimacije dva svojstvena para $(\hat\lambda, [\hat x;\ \hat y])$ i $(-\hat\lambda, [\hat x;\ -\hat y])$, odgovarajući vektori reziduala nasljeđuju strukturu:

$$\begin{bmatrix} r_x \\ r_y \end{bmatrix} = (A - \hat\lambda B) \begin{bmatrix} \hat x \\ \hat y \end{bmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{bmatrix} r_x \\ -r_y \end{bmatrix} = (A + \hat\lambda B) \begin{bmatrix} \hat x \\ -\hat y \end{bmatrix}.$$

Ponovno, razumno je zahtjevati da je ta struktura očuvana i kod prekondicioniranih reziduala $T_+\left[\begin{smallmatrix} r_x \\ r_y \end{smallmatrix}\right]$ i $T_-\left[\begin{smallmatrix} r_x \\ -r_y \end{smallmatrix}\right]$. To općenito vrijedi ako i samo ako

$$T_- = \begin{bmatrix} I & \\ & -I \end{bmatrix} T_+ \begin{bmatrix} I & \\ & -I \end{bmatrix}.$$

Npr. to svojstvo vrijedi ako $T_+ = (A - \lambda_0 B)^{-1}$ i $T_- = (A + \lambda_0 B)^{-1}$ za neki definitni pomak λ_0.

***B*-ortonormalizacija.** Nakon nametanja zahtjeva na matricu početnih aproksimacija i matricu prekondicioniranog reziduala, matrica baze prije B-ortonormalizacije u Algoritmu 3.5 ima oblik

$$U = \begin{bmatrix} U_X & U_X \\ U_Y & -U_Y \end{bmatrix}, \qquad U_X, U_Y \in \mathbb{C}^{m\times p}. \tag{3.41}$$

Važno je da B-ortonormalizacija ne uništi tu strukturu. U tu svrhu, pogledajmo savršenu permutaciju stupaca od U:

$$\left[\begin{array}{cc|cc|cc|cc} u_{X,1} & u_{X,1} & u_{X,2} & u_{X,2} & \cdots & \cdots & u_{X,p} & u_{X,p} \\ u_{Y,1} & -u_{Y,1} & u_{Y,2} & -u_{Y,2} & \cdots & \cdots & u_{Y,p} & -u_{Y,p} \end{array}\right]. \tag{3.42}$$

Ako su U_X, U_Y realne matrice tada

$$\begin{bmatrix} u_{X,j} \\ u_{Y,j} \end{bmatrix}^T B \begin{bmatrix} u_{X,j} \\ -u_{Y,j} \end{bmatrix} = 0.$$

Stoga su individualni blok stupci u (3.42) već B-ortogonalni. B-ortogonalizacijska procedura (npr. Gram-Schmidt) se dalje računa u blokovima od po 2 stupca, što čuva strukturu (3.42). Permutiranjem nazad, dobivena B-ortonormirana baza nasljeđuje strukturu od U iz (3.41). Na isti način možemo postupati ako U_X i U_Y nisu realni. Uočimo, međutim, da dobivena baza neće biti B-ortogonalna unutar blok stupaca od (3.42).

Sažetak. Temeljeno na gornjim opažanjima, Algoritam 3.4 primijenjen na (3.35) s pravilno odabranom matricom početnih aproksimacija i matricom prekondicioniranja u potpunosti čuva blok strukturu (3.38) u iteracijskim matricama. Stoga se algoritam može formulirati u terminima $m \times p$ matrica $X^{(i)}, Y^{(i)}$ umjesto $2m \times 2p$ matrice. To reducira i memorijsko spremanje i računalni trošak. Još važnije, ova strategija čuva simetriju izračunatih svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora. Zbog uštede prostora i zbog uobičajeno brže konvergencije algoritma LOBPCG tipa u odnosu na BSD tip, dalje ćemo samo govoriti o pažljivoj reorganizaciji indefinitne 3-sheme, odnosno Algoritma 3.5.

Algoritam 3.6 Indefinitna LOBPCG metoda za produktni svojstveni problem

Ulaz: K, $M \in \mathbb{C}^{m\times m}$: Hermitske pozitivno definitne matrice;
$T_+ \in \mathbb{C}^{2m\times 2m}$: Hermitski pozitivno definitna matrica prekondicioniranja;
$\ell_+ \in \mathbb{N}$: broj željenih pozitivnih svojstvenih vrijednosti;
$X^{(0)}$, $Y^{(0)} \in \mathbb{C}^{m\times k_+}$: matrice početnih aproksimacija t.d. $k_+ \geq \ell_+$ i $(X^{(0)})^H Y^{(0)}$ je invertibilna.

Izlaz: ℓ najmanjih pozitivnih svojstvenih parova od KM.

B-ortonormirati $[X^{(0)}, X^{(0)}; Y^{(0)}, -Y^{(0)}]$.
$(\Theta^{(0)}, V^{(0)}) \leftarrow \mathrm{RR}([X^{(0)}, X^{(0)}; Y^{(0)}, -Y^{(0)}], A, B)$.
Ažurirati $[X^{(i+1)}; Y^{(i+1)}]$; $P_X^{(0)} = P_Y^{(0)} \leftarrow []$.
za $i = 0, 1, \ldots$ **čini**
  $R_X^{(i)} = KX^{(i)} - Y^{(i)}\Theta^{(i)}$, $R_Y^{(i)} = MY^{(i)} - X^{(i)}\Theta^{(i)}$.
  (neobavezno) Ukloniti deflacijom svojstvene vrijednosti.
  ako ako su željene svojstvene vrijednosti konvergirale **tada**
    Izaći iz petlje.
  kraj ako
  $[W_X^{(i)}; W_Y^{(i)}] \leftarrow T_+ \cdot [R_X^{(i)}; R_Y^{(i)}]$,
  $U_X^{(i)} \leftarrow [X^{(i)}, W_X^{(i)}, P_X^{(i)}]$, $U_Y^{(i)} \leftarrow [Y^{(i)}, W_Y^{(i)}, P_Y^{(i)}]$.
  B-ortonormirati $[U_X^{(i)}, U_X^{(i)}; U_Y^{(i)}, -U_Y^{(i)}]$.
  $(\Theta^{(i+1)}, V^{(i+1)}) \leftarrow \mathrm{RR}([U_X^{(i)}, U_X^{(i)}; U_Y^{(i)}, -U_Y^{(i)}], A, B)$.
  $P_X^{(i+1)} \leftarrow U_{X_2}^{(i)}(V_{X_2}^{(i+1)} + V_{Y_2}^{(i+1)})$, $P_Y^{(i+1)} \leftarrow U_{Y_2}^{(i)}(V_{X_2}^{(i+1)} - V_{Y_2}^{(i+1)})$.[a]
  $X^{(i+1)} \leftarrow U_{X_1}^{(i)}(V_{X_1}^{(i+1)} + V_{Y_1}^{(i+1)}) + P_X^{(i+1)}$, $Y^{(i+1)} \leftarrow U_{Y_1}^{(i)}(V_{X_1}^{(i+1)} - V_{Y_1}^{(i+1)}) + P_Y^{(i+1)}$.
kraj za
$(\Theta, [X; Y]) \leftarrow (\Theta^{(i)}, [X^{(i)}; Y^{(i)}])$.

[a] $V^{(i+1)}$ je podijeljeno po blokovima: $[V_{X_1}, V_{X_2}; V_{Y_1}, V_{Y_2}]$, gdje V_{X_1}, $V_{Y_1} \in \mathbb{C}^{m\times k_+}$.

Tada kao rezultat gornje specijalizacije i pažljive reorganizacije Algoritma 3.5, dobivamo Algoritam 3.6. Algoritam 3.6 i LOBP4DCG algoritam predložen u [5] rade nad istim potprostorom pa su zato i matematički ekvivalentni.

3.3.1 Numerički eksperiment

Eksperiment 3.12 ([42, Primjer 5.1]) U ovom primjeru razmatramo par (A, B) oblika (3.35) koji odgovara produktnom svojstvenom problemu KM. Kao što je razmatrano u primjerima [5] te se matrice dobivaju analizom linearnog odgovora (eng. linear response) matrice gustoće u računanjima elektronskih struktura. Konkretno, K i M su realne 5660×5660 simetrične pozitivno definitne. Cilj je izračunati četiri najmanje pozitivne svojstvene vrijednosti, koje su dane s

$$\lambda_1^+ \approx 0.541812517132466, \qquad \lambda_2^+ \approx 0.541812517132473,$$
$$\lambda_3^+ \approx 0.541812517132498, \qquad \lambda_4^+ \approx 0.615143209274579.$$

Tablica 3.6
Produktni svojstveni problem s egzaktnom inverznom matricom prekondicioniranja.

metoda	#(iter)	CPU vrijeme
LOBP4DCG s $T = T_0$	77	45.2
Algoritam 3.6 s $T_+ = T_0$	85	67.1
Algoritam 3.3 s $T = T_0$	77	88.1
LOBP4DCG s $T = T_{\lambda_0}$	19	27.7
Algoritam 3.6 s $T_+ = T_{\lambda_0}$	21	29.7
Algoritam 3.5 s $T_\pm = T_{\pm\lambda_0}$	20	53.8

Radimo usporedbu između naših algoritama: Algoritma 3.3 (indefinitni LOBPCG s jednom matricom prekondicioniranja), Algoritma 3.5 (indefinitni LOBPCG s dvije matrice prekondicioniranja) i Algoritma 3.6 te LOBP4DCG algoritma predloženog u [5].

Koristimo matricu prekondicioniranja

$$T_0 = A^{-1}, \quad T_{\pm\lambda_0} = (A \mp \lambda_0 B)^{-1}, \tag{3.43}$$

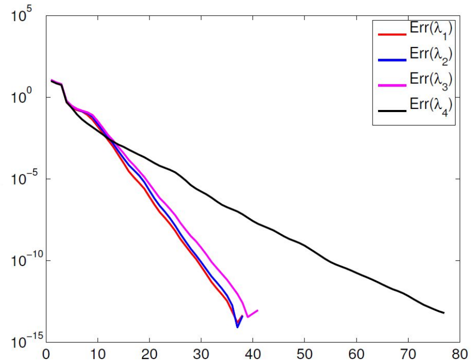
gdje je $\lambda_0 = 0.54$ relativno bliz pomak. Pripadne linearne sustave rješavamo koristeći Matlab-ov backslash operator. Koristimo $\mathsf{tol} = 10^{-7}$. Matricu početnih aproksimacija predloženu u (3.40) s $k = 4$ koristimo u Algoritmima 3.3 i 3.5, dok u LOBP4DCG i Algoritmu 3.6 koristimo $\begin{bmatrix} E_4 \\ E_4 \end{bmatrix}$ kao matricu početnih aproksimacija.

Tablica 3.6 sadrži broj potrebnih iteracija prije nego što su sve četiri željene svojstvene vrijednosti konvergirale. Kao što je očekivano iz rasprave u Potpoglavlju 3.3, svi algoritmi imaju slično konvergencijsko ponašanje kada koristimo istu matricu prekondicioniranja. Očekivano, koristeći matricu prekondicioniranja $T_{\pm\lambda_0}$ umjesto T_0 značajno se ubrzava konvergencija. Vremena izvršavanja su dana kao nekakva orijentacija; nismo pokušali optimizirati niti jedan algoritam. Bez obzira na to, ona reflektiraju da su Algoritam 3.6 i LOBP4DCG djelotvorniji jer iskorištavaju strukturu od A, B.

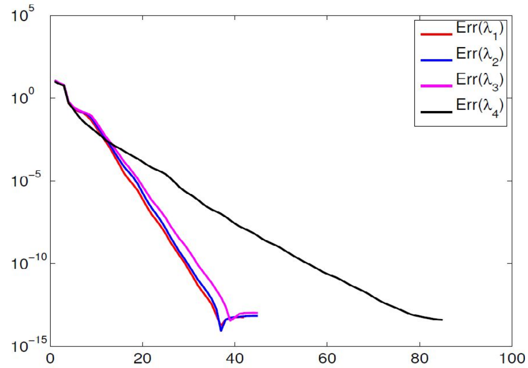
Slika 3.2 sadrži grafove relativnih grešaka četiri najmanje pozitivne Ritzove vrijednosti dobivene u i-toj iteraciji LOBP4DCG i Algoritma 3.6. Uočavamo da je konvergencija za prve tri Ritzove vrijednosti puno brža nego za četvrtu.

Štoviše, jasno se vidi efekt kvadratne rezidualne ocjene (3.30); greške u Ritzovim vrijednostima koje su uklonjene deflacijom ($\sim 10^{-13}$) su mnogo manje od $\mathsf{tol} = 10^{-7}$.

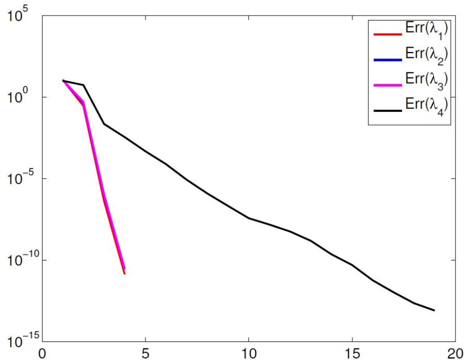
Dalje, zanima nas efekt zamjene egzaktne inverzne matrice prekondicioniranja (3.43) s manjim brojem iteracija CG metode primijenjene na A i $A \mp \lambda_0 B$, tim redom. Tolerancija zaustavljanja za unutarnje CG iteracije je postavljena na 10^{-2} i dopušteno je maksimalno 50 iteracija po jednom linearnom sustavu. U Tablici 3.7 su prikazani dobiveni rezultati, uključujući ukupan broj unutarnjih CG iteracija, potrebnih za konvergenciju svih željenih Ritzovih vrijednosti.



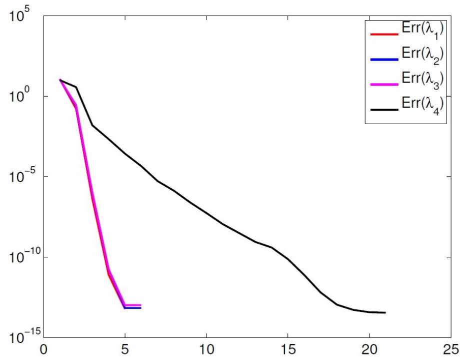
(a) LOBP4DCG s $T = T_0$



(b) Algoritam 3.6 s $T_+ = T_0$



(c) LOBP4DCG s $T = T_{\lambda_0}$



(d) Algoritam 3.6 s $T_+ = T_{\lambda_0}$

Slika 3.2: Relativne pogreške izračunatih pozitivnih svojstvenih vrijednosti primjenom LOBP4DCG-a i Algoritma 3.6 na matričnom paru iz Eksp. 3.12.

Tablica 3.7

Produktni svojstveni problem s prekondicioniranim rezidualima dobivenim pomoću CG-iteracija.

metoda	#(iter)	#(unut. iter)	CPU vrijeme (sek.)
LOBP4DCG s $T = T_0$	76	2716	284.9
Algoritam 3.6 s $T_\pm = T_0$	94	1965	243.6
Algoritam 3.3 s $T = T_0$	78	2722	571.0
LOBP4DCG s $T = T_{\lambda_0}$	20	2806	262.6
Algoritam 3.6 s $T_+ = T_{\lambda_0}$	27	1141	120.8
Algoritam 3.5 s $T_\pm = T_{\pm\lambda_0}$	20	1914	363.7

3.4 Proizvoljni spektralni intervali

Algoritam 3.2 (indefinitna varijanta m-sheme s jednom matricom prekondicioniranja) računa istovremeno manji broj svojstvenih vrijednosti oko definitnog intervala i pridruženih svojstvenih vektora danog pozitivno definitnog matričnog para. Ali, definitni je interval samo jedan poseban spektralni interval. U ovom potpoglavlju razvijamo neke ideje kako koristiti Algoritam 3.2 da bismo izračunali manji broj svojstvenih vrijednosti oko *proizvoljnog spektralnog intervala*, i pridruženih svojstvenih vektora, bilo kojeg *definitnog matričnog para* (A, B). Sjetimo se, konačne svojstvene vrijednosti definitnog para (A, B) su realne i takve da njihovi B-predznaci nisu izmiješani.

Neka $\lambda_{\min}$ označava najmanju i $\lambda_{\max}$ označava najveću konačnu svojstvenu vrijednost nekog pozitivno definitnog para (A, B) s konačnim svojstvenim vrijednostima (3.1a) i neka $\mathcal{I}_0$ označava njegov definitni interval[5]. Za dani proizvoljni pomak $\lambda_a \in \langle\lambda_{\min}, \lambda_{\max}\rangle\backslash\mathcal{I}_0$, koji nije svojstvena vrijednost para (A, B), neka je $\mathcal{I}_a$ *spektralni interval* oko λ_a, tj. $\lambda_a \in \mathcal{I}_a$ i, ili je $\mathcal{I}_a = \langle\lambda_i^+, \lambda_{i+1}^+\rangle$, za neki $i \in \{1, \dots, n_+ - 1\}$ ili je $\mathcal{I}_a = \langle\lambda_{j+1}^-, \lambda_j^-\rangle$, za neki $j \in \{1, \dots, n_- - 1\}$. Ako je (A, B) negativno definitan, spektralni interval oko λ_a definiramo analogno.
Cilj nam je sljedeći: želimo istovremeno izračunati manji broj svojstvenih vrijednosti oko danog pomaka λ_a, preciznije: prvih j_v svojstvenih vrijednosti koje su veće od λ_a, prvih j_m svojstvenih vrijednosti koje su manje od λ_a, i pridružene svojstvene vektore definitnog para (A, B). Da bismo mogli koristiti Algoritam 3.2, transformiramo (A, B) u neki pomoćni pozitivno definitan par s definitnim intervalom oko nule i tada koristimo Algoritam 3.2 koji računa $j_v + j_m$ svojstvenih vrijednosti oko nule i pridružene svojstvene vektore tog pomoćnog para, te posljedično i željene svojstvene vrijednosti oko λ_a i pridružene svojstvene vektore para (A, B). Teoremi, dani niže, dopuštaju korisniku da sam odredi željeni spektralni interval i da izračuna manji broj svojstvenih parova oko tog intervala.

Pretpostavimo prvo da je B pozitivno definitna i λ_a iz bilo kojeg željenog spektralnog intervala $\mathcal{I}_a$. Sada je $\mathcal{I} := \mathcal{I}_a - \lambda_a$ željeni spektralni interval oko nule para $(A - \lambda_a B, B)$ i njegov svojstveni par (μ, x) odgovara svojstvenom paru $(\mu + \lambda_a, x)$ para (A, B). Jednostavno slijedi da je $\mathcal{I}$ definitni interval pozitivno definitnog para

$$(B^{-1}, (A - \lambda_a B)^{-1})$$

koji ima iste svojstvene vrijednosti kao i $(A - \lambda_a B, B)$, svojstveni vektori su samo pomnoženi s B, pa možemo primijeniti Algoritam 3.2. Ovo se može proširiti na bilo koji definitan par *s poznatim definitnim intervalom, ili, barem s njegovim dijelom.* Naime,

[5] Ako $B \preceq 0$ tada $\mathcal{I}_0 = \langle\lambda_{\max}, \infty\rangle$. Ako $B \succeq 0$ tada $\mathcal{I}_0 = \langle-\infty, \lambda_{\min}\rangle$.

neka je λ_0 definitni pomak pozitivno definitnog para (A, B). Tada je $A - \lambda_0 B$ pozitivno definitna i svojstveni par (λ, x) para (A, B) odgovara svojstvenom paru $(\lambda - \lambda_0, x)$ para $(A - \lambda_0 B, B)$. Sada možemo primijeniti prethodni slučaj na par $(B, A - \lambda_0 B)$ u kojemu svojstveni par $(1/(\lambda - \lambda_0), x)$ odgovara svojstvenom paru (λ, x) para (A, B).

Nedostatak ovog načina je što moramo znati inverze, ili barem, biti u mogućnosti točno i jednostavno rješavati linearne sustave jednadžbi tipa

$$Bx = c \quad \text{i} \quad (A - \lambda_a B)x = c.$$

No, postoji drugačiji način. Za početak, zbog jednostavnosti, pretpostavimo da je $B = I$. Sada napravimo indefinitnu dekompoziciju

$$A - \lambda_a I = GJG^H \tag{3.44}$$

gdje je λ_a bilo koji broj iz spektralnog intervala $\mathcal{I}_a$ hermitske matrice A, J je hermitska invertibilna, tj.

$$J^H = J^{-1} = J. \tag{3.45}$$

Tipično, ali ne nužno, J je dijagonalna. Ako je $J = I$ ili $J = -I$ to povlači da je $\lambda_a < \lambda_{\min}$, $\lambda_a > \lambda_{\max}$, tim redom, tj. λ_a nije ni iz jednog spektralnog intervala. U ovom slučaju, možemo nastaviti, i na kraju, izračunati vanjsku svojstvenu vrijednost: $\lambda_{\min}$ ili $\lambda_{\max}$ i one najbliže njima. Ali, nas zapravo zanima indefinitna matrica J.

Promotrimo pomoćni par

$$(G^H G, J).$$

Zbog (3.45) slijedi da ovaj par ima iste svojstvene vrijednosti kao i zadani par (A, I) i da ima J-ortonormirane svojstvene vektore. Preciznije, vrijedi

Teorem 3.13 Neka je A dana hermitska matrica i neka U ima ortonormirane stupce: $U^H U = I_p$, koja razapinje spektralni potprostor matrice $A_a := A - \lambda_a I$, tj.

$$A_a U = U \Lambda_a \tag{3.46}$$

gdje je $\Lambda_a := \Lambda - \lambda_a I$, Λ dijagonalna matrica svojstvenih vrijednosti matrice A (i može biti manjeg reda od A) . Definirajmo

$$F := G^{-1} U |\Lambda_a|^{1/2} \text{ ili, ekvivalentno, } U := GF|\Lambda_a|^{-1/2} \tag{3.47}$$

za G, J iz (3.44). Tada

$$F^H J F = \mathcal{J}, \tag{3.48}$$

gdje je $\mathcal{J} = \operatorname{sign} \Lambda_a$ (tj. F je $J, \mathcal{J}$-izometrija) i

$$G^H G F = J F \Lambda_a, \tag{3.49}$$

tj. stupci matrice F razapinju odgovarajući spektralni potprostor para $(G^H G, J)$. Obratno, (3.49) i (3.48) povlače (3.46) i činjenicu da U ima ortonormirane stupce.

Dokaz. Pomnožimo s lijeva $A_a U = U\Lambda_a$ s A_a^{-1}, a s desna s Λ_a^{-1} pa dobivamo

$$U\Lambda_a^{-1} = A_a^{-1} U. \tag{3.50}$$

Sada,

$$\begin{aligned} F^H J F &= |\Lambda_a|^{1/2} U^H G^{-H} J G^{-1} U |\Lambda_a|^{1/2} = \\ &= |\Lambda_a|^{1/2} U^H A_a^{-1} U |\Lambda_a|^{1/2} = \\ &= |\Lambda_a|^{1/2} U^H U \Lambda_a^{-1} |\Lambda_a|^{1/2} = \\ &= |\Lambda_a|^{1/2} \Lambda_a^{-1} |\Lambda_a|^{1/2} = \mathcal{J}. \end{aligned} \tag{3.51}$$

s $\mathcal{J} = \operatorname{sign} \Lambda_a$. (3.51) slijedi iz (3.50). Za drugi dio dokaza pomnožimo (3.44) s lijeva s JG^{-1} pa dobivamo

$$G^H = J G^{-1} A_a. \tag{3.52}$$

Sada,

$$\begin{aligned} G^H G F &= G^H G G^{-1} U |\Lambda_a|^{1/2} = G^H U |\Lambda_a|^{1/2} = \\ &= J G^{-1} A_a U |\Lambda_a|^{1/2} = J G^{-1} U \Lambda_a |\Lambda_a|^{1/2} = \\ &= J G^{-1} U |\Lambda_a|^{1/2} |\Lambda_a|^{-1/2} \Lambda_a |\Lambda_a|^{1/2} = \\ &= J F \Lambda_a. \end{aligned} \tag{3.53}$$

(3.53) slijedi iz (3.52) i (3.46).
Obratno, koristeći (3.44), (3.49) i $J^2 = I$ dobivamo

$$\begin{aligned} A_a U &= G J G^H G F |\Lambda_a|^{-1/2} = \\ &= G J J F \Lambda_a |\Lambda_a|^{-1/2} = \\ &= G F |\Lambda_a|^{-1/2} |\Lambda_a|^{1/2} \Lambda_a |\Lambda_a|^{-1/2} = \\ &= U \Lambda_a. \end{aligned}$$

Sada,

$$U^H U = |\Lambda_a|^{-1/2} F^H G^H G F |\Lambda_a|^{-1/2} =$$

$$= |\Lambda_a|^{-1/2} F^H J F \Lambda_a |\Lambda_a|^{-1/2} = \tag{3.54}$$

$$= |\Lambda_a|^{-1/2} \operatorname{sign}(\Lambda_a) \Lambda_a |\Lambda_a|^{-1/2} = I_p. \tag{3.55}$$

(3.54) slijedi iz (3.49), a (3.55) slijedi iz (3.48). □

Štoviše, $\mathcal{I} := \mathcal{I}_a - \lambda_a$ je definitni interval pozitivno definitnog para $(G^H G, J)$ na koji primijenjujemo Algoritam 3.2 s $\ell_+ = j_v$, $\ell_- = j_m$. Nakon što Algoritam 3.2 završi, dijagonalna matrica $\Lambda = \Lambda_a + \lambda_a I$ sadrži željene svojstvene vrijednosti oko λ_a, dok $U = GF|\Lambda_a|^{-1/2}$ sadrži pridružene svojstvene vektore matrice A.

Ako je u paru (A, B) matrica B pozitivno definitna, tada koristeći Cholesky dekompoziciju $B = LL^H$ matricu G u prethodnom teoremu trebamo zamijeniti s $L^{-1}G$. Preciznije, vrijedi

Teorem 3.14 Neka je (A, B) dani hermitski par s pozitivno definitnom B. Promotrimo indefinitnu dekompoziciju

$$A - \lambda_a B = CJC^H \tag{3.56}$$

gdje je λ_a bilo koji broj iz spektralnog intervala $\mathcal{I}_a$ para (A, B); J je kao u (3.45) i Cholesky dekompoziciju

$$B = LL^H.$$

Neka V ima B-ortonormirane stupce: $V^H B V = I_p$, takva da njezini stupci razapinju spektralni potprostor para $(A - \lambda_a B, B)$, tj.

$$(A - \lambda_a B)V = BV\Lambda_a \tag{3.57}$$

gdje

$$\Lambda_a := \Lambda - \lambda_a I_p, \tag{3.58}$$

Λ je dijagonalna matrica svojstvenih vrijednosti para (A, B) (i može biti manjeg reda od A) . Definirajmo

$$F := C^{-1} LL^H V |\Lambda_a|^{1/2} \text{ ili, ekvivalentno, } V := L^{-H} L^{-1} CF |\Lambda_a|^{-1/2}.$$

Tada

$$F^H J F = \mathcal{J}, \tag{3.59}$$

gdje je $\mathcal{J} = \operatorname{sign} \Lambda_a$ (tj. F je $J, \mathcal{J}$-izometrija) i

$$(L^{-1}C)^H (L^{-1}C) F = JF\Lambda_a, \tag{3.60}$$

tj. F razapinje odgovarajući spektralni potprostor para $((L^{-1}C)^H (L^{-1}C), J)$. Obratno, (3.60) i (3.59) povlače (3.57) i činjenicu da V ima B-ortonormirane stupce.

Dokaz. Neka je $A_1 = L^{-1}AL^{-H}$, $U = L^H V$ i $G = L^{-1}C$. Pomnožimo (3.56) s lijeva s L^{-1} i pomnožimo s desna s L^{-H}, koristeći $G = L^{-1}C$ dobivamo

$$A_1 - \lambda_a I = GJG^H.$$

Pomnožimo s lijeva (3.57) s L^{-1} i koristeći $U = L^H V$ dobivamo

$$(A_1 - \lambda_a I)U = U\Lambda_a.$$

Sada, $U^H U = V^H L^H L V = V^H B V = I_p$, definirajmo $F = G^{-1}U|\Lambda_a|^{1/2}$ i primijenimo Teorem 3.13 sa supstitucijom $A \to A_1$ i Λ_a iz (3.58). □

Štoviše, $\mathcal{I} := \mathcal{I}_a - \lambda_a$ je definitni interval pozitivno definitnog para $((L^{-1}C)^H(L^{-1}C), J)$ na koji primijenjujemo Algoritam 3.2 s $\ell_+ = j_v$, $\ell_- = j_m$. Nakon što Algoritam 3.2 završi, dijagonalna matrica $\Lambda = \Lambda_a + \lambda_a I$ sadrži željene svojstvene vrijednosti oko λ_a, dok $V = L^{-H}L^{-1}CF|\Lambda_a|^{-1/2}$ sadrži pridružene svojstvene vektore para (A, B) s pozitivno definitnom B.

Napomena 3.15 Ako je dani matrični par (A, B) s negativno definitnom B, tada vrijedi analogan teorem (promotramo pomoćni par $(A - \lambda_a B, -B)$).

Konačno, dajemo teorem za definitne parove (A, B) s indefinitnom B (koja može biti neinvertibilna) i λ_a iz bilo kojeg spektralnog intervala.

Teorem 3.16 Neka je (A, B) dani pozitivno definitan par s indefinitnom B. Neka je λ_0 proizvoljan definitni pomak, i definirajmo $\widetilde{A} := A - \lambda_0 B$, koja je pozitivno definitna. Promotrimo indefinitnu dekompoziciju

$$B - \frac{1}{\lambda_a - \lambda_0}\widetilde{A} = CJC^H$$

gdje je λ_a bilo koji broj iz spektralnog intervala $\mathcal{I}_a$ para (A, B); J je kao u (3.45) i Cholesky dekompoziciju

$$\widetilde{A} = LL^H.$$

Neka V ima $\widetilde{A}$-ortonormirane stupce: $V^H\widetilde{A}V = I_p$, takva da njezini stupci razapinju spektralni potprostor para $(B - \frac{1}{\lambda_a - \lambda_0}\widetilde{A}, \widetilde{A})$, tj.

$$\left(B - \frac{1}{\lambda_a - \lambda_0}\widetilde{A}\right)V = \widetilde{A}V\Lambda_{0a} \tag{3.61}$$

gdje

$$\Lambda_{0a} = (\Lambda - \lambda_0 I_p)^{-1} - (\lambda_a - \lambda_0)^{-1}I_p,$$

Λ je dijagonalna matrica svojstvenih vrijednosti para (A, B) (i može biti manjeg reda od A) . Definirajmo

$$F := C^{-1}LL^HV|\Lambda_{0a}|^{1/2} \text{ ili, ekvivalentno, } V := L^{-H}L^{-1}CF|\Lambda_{0a}|^{-1/2}.$$

Tada

$$F^HJF = \mathcal{J}, \tag{3.62}$$

gdje je $\mathcal{J} = \operatorname{sign} \Lambda_{0a}$ (tj. F je $J, \mathcal{J}$-izometrija) i

$$(L^{-1}C)^H(L^{-1}C)F = JF\Lambda_{0a}, \tag{3.63}$$

tj. F razapinje odgovarajući spektralni potprostor para $((L^{-1}C)^H(L^{-1}C), J)$. Obratno, (3.63) i (3.62) povlače (3.61) i činjenicu da V ima $\widetilde{A}$-ortonormirane stupce.

Dokaz. Dokaz slijedi izravno iz Teorema 3.14 koristeći supstituciju $A-\lambda_aB \to B-\frac{1}{\lambda_a-\lambda_0}\widetilde{A}$, $B \to \widetilde{A}$ i $\Lambda_a \to \Lambda_{0a}$. □

Štoviše, $\mathcal{I} := 1/(\mathcal{I}_a - \lambda_0) - 1/(\lambda_a - \lambda_0)$ je definitni interval pozitivno definitnog para $((L^{-1}C)^H(L^{-1}C), J)$ na koji primijenjujemoAlgoritam 3.2 s $\ell_+ = j_m, \ell_- = j_v$ (uočimo zamjenu indekasa u odnosu na prethodne teoreme). Nakon što Algoritam 3.2 završi, dijagonalna matrica $\Lambda = (\Lambda_{0a}+(\lambda_a-\lambda_0)^{-1}I_p)^{-1}+\lambda_0 I_p$ sadrži željene svojstvene vrijednosti oko λ_a, dok $V = L^{-H}L^{-1}CF|\Lambda_{0a}|^{-1/2}$ sadrži pridružene svojstvene vektore pozitivno definitnog para (A, B) s indefinitnom B.

Napomena 3.17 Ako je par (A, B) negativno definitan s indefinitnom B, tada vrijedi analogan teorem (promotramo pomoćni par $(B - \frac{1}{\lambda_a-\lambda_0}\widetilde{A}, -\widetilde{A})$).

Napomena 3.18 Vidjeli smo da smo umjesto rada sa zadanim matricama A, B primijenjivali Algoritam 3.2 na pomoćni par (G^HG, J), odnosno $((L^{-1}C)^H(L^{-1}C), J)$. No, te pomoćne parove koristimo implicitno, tj. ne formiramo eksplicitno matricu G^HG niti $(L^{-1}C)^H(L^{-1}C)$. Kako Algoritam 3.2 zahtjeva samo operacije množenja matrice s vektorom i rješavanje linearnih sustava, u daljnjem tekstu navodimo kako ćemo implicitno raditi te operacije na pomoćnim matricama G^HG, $(L^{-1}C)^H(L^{-1}C)$, tim redom.

a) Računanje vektora G^HGx implementiramo na način: $G^H(Gx)$, dok računanje prekondicioniranih reziduala $w = Tr$ s $T = (G^HG)^{-1}$ implementiramo rješavanjem dvaju linearnih sustava $G^Hz = r$ i $Gw = z$.

b) Ukoliko eksplicitno formiramo matricu $G := L^{-1}C$, onda postupamo kao u a) slučaju. Ukoliko ćemo raditi s matricama L i C onda računanje vektora $t := (L^{-1}C)^H(L^{-1}C)x$ implementiramo na sljedeći način:

$$\begin{aligned}
y &= Cx && \text{množenje matrice s vektorom} \\
Lz &= y && \text{rješavanje linearnog sustava} \\
L^H v &= z && \text{rješavanje linearnog sustava} \\
C^H v &= t && \text{množenje matrice s vektorom}
\end{aligned}$$

Računanje prekondicioniranih reziduala $w = Tr$ s $T = \Big((L^{-1}C)^H(L^{-1}C)\Big)^{-1}$, tj. rješavanje linearnog sustava $(L^{-1}C)^H(L^{-1}C)w = r$ implementiramo na sljedeći način:

$$\begin{aligned}
C^H p &= r && \text{rješavanje linearnog sustava} \\
s &= L^H p && \text{množenje matrice s vektorom} \\
t &= Ls && \text{množenje matrice s vektorom} \\
Cw &= t && \text{rješavanje linearnog sustava}
\end{aligned}$$

Napomena 3.19 Iza dokaza sva tri teorema ovog potpoglavlja naveli smo kako izgleda dijagonalna matrica Λ koja sadrži aproksimacije svojstvenih vrijednosti i matrica U, odnosno V koja sadrži aproksimacije svojstvenih vektora danog matričnog para. Stupci matrice U iz Teorema 3.13 su ortonormirani (u euklidskom skalarnom produktu), kako i treba biti jer je zadana hermitska matrica A, tj. matrični par (A, I). Stupci matrice V iz Teorema 3.14 su B-ortonormirani, kako i treba biti jer je zadan par (A, B) s pozitivno definitnom B. No, stupci matrice V iz Teorema 3.16 su $\widetilde{A}$-ortonormirani, što nije uobičajeno jer je zadan par (A, B) s indefinitnom B. No, koristeći $V^H\widetilde{A}V = I_p$, te množeći (3.61) s lijeva s V^H slijedi da je $V^HBV = \Lambda_{0a} + \frac{1}{\lambda_a - \lambda_0}I_p$, tj. V^HBV je dijagonalna, što povlači da su stupci matrice V B-ortogonalni. Još ih je potrebno samo B-normirati da budu i B-ortonormirani, kako i treba biti.

3.4.1 Numerički eksperiment

Eksperiment 3.20 U ovom eksperimentu želimo izračunati rubove proizvoljnog spektralnog intervala oko danog pomaka λ_a koristeći Algoritam 3.3 (indefinitni LOBPCG) s $\mathsf{tol} = 10^{-7}$ u (3.19), $\ell_\pm = j_v = j_m = 1$ primijenjen na pomoćni par (G^HG, J). Konkretno, koristit ćemo petdijagonalni matrični par (A_1, B_1) iz (2.25) dobiven jednom linearizacijom KSP iz Eksperimenta 2.19. Neka je λ_0 proizvoljni definitni pomak i λ_a dani pomak iz bilo kojeg spektralnog intervala pozitivno definitnog para (A, B) iz (2.24), odnosno (A_1, B_1). Definirajmo $\widetilde{A}_1 := A_1 - \lambda_0 B_1 \succ 0$. Promotrimo indefinitnu dekompoziciju $B_1 - \frac{1}{\lambda_a - \lambda_0}\widetilde{A}_1 = CJC^H$ dobivenu s [75, Prvi dio Odjeljka 2], ali s pivotnom strategijom za petdijagonalne matrice danoj u [11, Algoritam E]. Neka je $G := L^{-1}C$, gdje je L donje trokutasti Cholesky faktor matrice $\widetilde{A}_1$ (usp. Teorem 3.16). Matrica L uz dijagonalu ima popunjene još samo prve dvije subdijagonale, ostalo su nule. Matrica C je vrpčasta (devetdijagonalna) pa je matrica G donjetrokutasta s povremenim izbočinama dva nenul-elemenata unutar retka nakon dijagonalnog elementa. Koristimo dva odgovarajuća stupca

Tablica 3.8
KSP iz Eksp. 3.20 s $n = 1000$, $\lambda_0 = -5$ i $\lambda_a = -30$.

spektralni interval koristeći Teorem 3.16	$(-30.02500653511912, -29.96223922122716)$
spektralni interval koristeći (2.22)	$(-30.02500653511911, -29.96223922122716)$
$V^H \widetilde{A} V \approx$	$\begin{bmatrix} 1 & -8.2 \cdot 10^{-14} \\ -8.2 \cdot 10^{-14} & 1 \end{bmatrix}$
$\|Av_m - \lambda_m B v_m\|_2 \approx$	$2.8 \cdot 10^{-9}$
$\|Av_v - \lambda_v B v_v\|_2 \approx$	$8.3 \cdot 10^{-8}$
$\|B_1 - \frac{1}{\lambda_a - \lambda_0} \widetilde{A}_1 - CJC^H\|_2 \approx$	$2.2 \cdot 10^{-14}$
#(iter) za indefinitni LOBPCG	17
CPU vrijeme za indefinitnu dekompoziciju	108
CPU vrijeme za indefinitni LOBPCG	78

matrice I_n za početnu matricu aproksimacija u Algoritmu 3.3 koji radi s faktorom G (v. Napomenu 3.18 b)). Matrica aproksimacija svojstvenih vektora para (A, B) iz (2.24) je $V = PL^{-H} GF |\Lambda_{0a}|^{-1/2} = [v_m, v_v]$, gdje je P matrica permutacije iz Odjeljka 1.2.6.

Tablica 3.9
KSP iz Eksp. 3.20 s $n = 1000$, $\lambda_0 = -5$ i $\lambda_a = -0.5086$.

spektralni interval koristeći Teorem 3.16	$(-0.5086139260589304, -0.5085953310730504)$
spektralni interval koristeći (2.22)	$(-0.5086139260589301, -0.5085953310730504)$
$V^H \widetilde{A} V \approx$	$\begin{bmatrix} 1 & -1.4 \cdot 10^{-14} \\ -1.4 \cdot 10^{-14} & 1 \end{bmatrix}$
$\|Av_m - \lambda_m B v_m\|_2 \approx$	$8.6 \cdot 10^{-10}$
$\|Av_v - \lambda_v B v_v\|_2 \approx$	$3.4 \cdot 10^{-13}$
$\|B_1 - \frac{1}{\lambda_a - \lambda_0} \widetilde{A}_1 - CJC^H\|_2 \approx$	$8.9 \cdot 10^{-16}$
#(iter) za indefinitni LOBPCG	14
CPU vrijeme za indefinitnu dekompoziciju	114
CPU vrijeme za indefinitni LOBPCG	60

Slika 3.1 prikazuje spektar para (A_1, B_1) za $n = 1000$ i $n = 2000$. Želimo odrediti jedan B-negativan i jedan B-pozitivan spektralni interval otprilike u sredini B-negativnih svojstvenih vrijednosti i B-pozitivnih svojstvenih vrijednosti, tim redom. Rezultati za $n = 1000$ dani su u Tablici 3.8 i Tablici 3.9, tim redom.

Zaključak

U prvom dijelu ove disertacije predstavili smo nove algoritme ispitivanja je li dani hermitski matrični par definitan ili nije. Neke varijante algoritma ispitivanja potprostora pokazuju se vrlo efikasnima u numeričkim primjerima i mogu konkurirati lučnom algoritmu.

U drugom dijelu ove disertacije predstavili smo nove algoritme koji računaju unutarnje svojstvene vrijednosti i pridružene svojstvene vektore pozitivno definitnog matričnog para s indefinitnim matricama. Dali smo opću strukturu takvih indefinitnih algoritama, te posebno predstavili indefinitne prekondicionirane gradijentne iteracije. One koriste definitne pomake i posebno su efikasni ako su ti pomaci već dovoljno dobre aproksimacije rubova definitnog intervala.

Algoritmi su posebno pogodni za velike rijetko popunjene matrične parove jer se ne koriste operacije matričnog množenja, nego samo operacije matrica puta vektor te (približno) rješavanje linearnih sustava. Također mogu se koristili u slučajevima kada matrice A, B ni nisu zadane eksplicitno, nego su dane samo procedure koje za dani vektor x vraćaju vektor Ax, Bx, tim redom.

Mogući nastavak istraživanja vidimo u predlaganju algoritama za pozitivno semidefinitne matrične parove (A, B) na temelju principa minimizacije traga iz [41, 49] kod kojih ne postoji definitni interval: postoji $\lambda_0 \in \mathbb{R}$ takav da je $A - \lambda_0 B$ pozitivno semidefinitna. U toj se situaciji čini teškim konstruirati efikasne matrice prekondicioniranja. Vrlo vjerojatno, trebala bi se koristiti informacija o nulpotprostoru matrice $A - \lambda_0 B$, slično tehnikama raspravljanima u [1]. Nadalje, može se napraviti algoritam ispitivanja hiperbolnosti kvadratnog svojstvenog problema na temelju rada [48] koji ne zahtjeva korištenje linearizacijskog matričnog para duplo većeg reda.

Na kraju potrebno je dotjerati naše istraživačke kodove i javno ih distribuirati.

Bibliografija

[1] P. Arbenz i Z. Drmač. "On positive semidefinite matrices with known null space". *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 24.1 (2002), str. 132–149.

[2] C. Ashcraft, R. G. Grimes i J. G. Lewis. "Accurate Symmetric Indefinite Linear Equation Solvers". *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 20.2 (travanj 1999), str. 513–561. ISSN: 0895-4798. DOI: 10.1137/S0895479896296921.

[3] Z. Bai, J. W. Demmel, J. J. Dongarra, A. Ruhe i H. van der Vorst, ur. *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A Practical Guide*. Software, Environments, and Tools. Philadelphia, PA: SIAM, 2000.

[4] Z. Bai i R.-C. Li. "Minimization Principles for the Linear Response Eigenvalue Problem I: Theory". *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 33.4 (2012), str. 1075–1100. ISSN: 0895-4798. DOI: 10.1137/110838960.

[5] Z. Bai i R.-C. Li. "Minimization Principles for the Linear Response Eigenvalue Problem II: Computation". *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 34.2 (2013), str. 392–416. DOI: 10.1137/110838972.

[6] Z. Bai i R.-C. Li. *Minimization Principles for the Linear Response Eigenvalue Problem III: General Case*. Mathematics Preprint Series. The University of Texas, Arlington, siječanj 2013, str. 38.

[7] T. Betcke, N. J. Higham, V. Mehrmann, C. Schröder i F. Tisseur. *NLEVP: A Collection of Nonlinear Eigenvalue Problems*.

[8] J.R. Bunch. "Analysis of the Diagonal Pivoting Method". *SIAM J.Numer.Anal.* 8.4 (1971), str. 656–680.

[9] J.R. Bunch. "Partial Pivoting Strategies for Symmetric Matrices". *SIAM J.Numer.Anal.* 11.3 (1974), str. 521–528.

[10] J.R. Bunch, L. Kaufman i B.N. Parlett. "Decomposition of a symmetric matrix". English. *Numer. Math.* 27.1 (1976), str. 95–109. ISSN: 0029-599X. DOI: 10.1007/BF01399088.

[11] J.R. Bunch i L. Kaufmann. "Some stable methods for calculating inertia and solving symmetric linear systems". *Math. Comp.* 31.137 (1977), str. 163–179.

[12] J.R. Bunch i R.F. Marcia. “A pivoting strategy for symmetric tridiagonal matrices”. *Numer. Linear Algebra Appl.* 12.9 (2005), str. 911–922.

[13] J.R. Bunch i R.F. Marcia. “A simplified pivoting strategy for symmetric tridiagonal matrices”. *Numer. Linear Algebra Appl.* 13.10 (2006), str. 865–867.

[14] J.R. Bunch i B.N. Parlett. “Direct methods for solving symmetric indefinite systems of linear equations”. *SIAM J.Numer.Anal.* 8.4 (1971), str. 639–655.

[15] Yanqing Chen, Timothy A. Davis, William W. Hager i Sivasankaran Rajamanickam. “Algorithm 887: CHOLMOD, Supernodal Sparse Cholesky Factorization and Update/Downdate”. *ACM Trans. Math. Softw.* 35.3 (listopad 2008), 22:1–22:14. ISSN: 0098-3500. DOI: 10.1145/1391989.1391995.

[16] S.H. Cheng i N.J. Higham. “The nearest definite pair for the Hermitian generalized eigenvalue problem”. *Linear Algebra Appl.* 302-303 (1999), str. 63–76. ISSN: 0024-3795.

[17] C. R. Crawford. “Algorithm 646: PDFIND: A Routine to Find a Positive Definite Linear Combination of Two Real Symmetric Matrices”. *ACM Trans. Math. Softw.* 12.3 (rujan 1986), str. 278–282. ISSN: 0098-3500. DOI: 10.1145/7921.214335.

[18] C.R. Crawford. “A Stable Generalized Eigenvalue Problem”. *SIAM J.Numer.Anal.* 13 (1976), str. 854–860.

[19] C.R. Crawford i Y.S. Moon. “Finding a positive definite linear combination of two Hermitian matrices”. *Linear Algebra Appl.* 51 (1983), str. 37–48. ISSN: 0024-3795.

[20] E.R. Davidson. “The iterative calculation of a few the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real symmetric matrices”. *J. Comput. Phys.* 17 (1975), str. 87–94.

[21] T. A. Davis. *Direct methods for sparse linear systems.* Sv. 2. Fundamentals of Algorithms. Philadelphia, PA: Society for Industrial i Applied Mathematics (SIAM), 2006, str. xii+217. ISBN: 978-0-898716-13-9; 0-89871-613-6.

[22] J. W. Demmel. *Applied Numerical Linear Algebra.* Philadelphia, PA: SIAM, 1997.

[23] Z. Drmač i V. Hari. “On quadratic convergence bounds for the J-symmetric Jacobi method”. English. *Numer. Math.* 64.1 (1993), str. 147–180. ISSN: 0029-599X. DOI: 10.1007/BF01388685.

[24] Iain S. Duff. “MA57—a Code for the Solution of Sparse Symmetric Definite and Indefinite Systems”. *ACM Trans. Math. Softw.* 30.2 (lipanj 2004), str. 118–144. ISSN: 0098-3500. DOI: 10.1145/992200.992202.

[25] E. G. Dyakonov. *Optimization in Solving Elliptic Problems.* Florida: CRC Press, Boca Raton, 1996.

[26] S. Falk i P. Langemeyer. "Das Jacobische Rotationsverfahren für reellsymmetrische Matrizenpaare I, II". *Elektronische Datenverarbeitung* (1960), str. 30–43.

[27] H.-Y. Fan, W.-W. Lin i P. Van Dooren. "Normwise scaling of second order polynomial matrices". *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 26.1 (2004), str. 252–256.

[28] C.-H. Guo, N.J. Higham i Tisseur F. "Detecting and Solving Hyperbolic Quadratic Eigenvalue Problems". *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 30 (4 2009), str. 1593–1613.

[29] C.-H. Guo, N.J. Higham i F. Tisseur. "An Improved Arc Algorithm for Detecting Definite Hermitian Pairs". *SIAM. J. Matrix Anal. Appl.* 31.3 (2010), str. 1131–1151. DOI: 10.1137/08074218X. eprint: http://dx.doi.org/10.1137/08074218X.

[30] P. C. Hansen i P. Y. Yalamov. "Symmetric rank revealing factorizations". *Recent advances in numerical methods and applications, II (Sofia, 1998)*. World Sci. Publ., River Edge, NJ, 1999, str. 687–695.

[31] V. Hari, S. Singer i S. Singer. "Block-oriented J-Jacobi methods for Hermitian matrices". *Linear Algebra Appl.* 433.8-10 (2010), str. 1491–1512. ISSN: 0024-3795. DOI: 10.1016/j.laa.2010.06.032.

[32] U. Hetmaniuk i R. Lehoucq. "Basis selection in LOBPCG". *J. Comput. Phys.* 218.1 (2006), str. 324–332. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/j.jcp.2006.02.007.

[33] N. J. Higham, F. Tisseur i P. Van Dooren. "Detecting a definite Hermitian pair and a hyperbolic or elliptic quadratic eigenvalue problem, and associated nearness problems". *Linear Algebra Appl.* 351/352 (2002), str. 455–474. ISSN: 0024-3795.

[34] *HSL. A collection of Fortran codes for large scale scientific computation.* 2011.

[35] L. Kaufman. "The retraction algorithm for factoring banded symmetric matrices". *Numer. Linear Algebra Appl.* 14.3 (2007), str. 237–254.

[36] D. Keller. "Divide-et-Impera-Verfahren für das verallgemeinerte Eigenwertproblem". Disertacija. FernUniversität-Gesamthochschule, Hagen, 1994.

[37] A. V. Knyazev i K. Neymeyr. "Efficient solution of symmetric eigenvalue problems using multigrid preconditioners in the locally optimal block conjugate gradient method". *Electron. Trans. Numer. Anal.* 15 (2003), str. 38–55. ISSN: 1068-9613.

[38] A.V. Knyazev. "A Preconditioned Conjugate Gradient Method for Eigenvalue Problems and its Implementation in a Subspace". English. *Numerical Treatment of Eigenvalue Problems Vol. 5 / Numerische Behandlung von Eigenwertaufgaben Band 5*. Ur. J. Albrecht, L. Collatz, P. Hagedorn i W. Velte. Sv. 96. International Series of Numerical Mathematics / Internationale Schriftenreihe zur Numerischen Mathematik / Srie Internationale dAnalyse Numrique. Birkhuser Basel, 1991, str. 143–154. ISBN: 978-3-0348-6334-6. DOI: 10.1007/978-3-0348-6332-2_11.

[39] A.V. Knyazev. "Preconditioned eigensolvers - an oxymoron?": *Electron. Trans. Numer. Anal.* 7 (1998), str. 104–123.

[40] A.V. Knyazev. "Toward the optimal preconditioned eigensolver: Locally optimal block preconditioned conjugate gradient method". *SIAM J. Sci. Comput.* 23.2 (2001), str. 517–541.

[41] J. Kovač-Striko i K. Veselić. "Trace minimization and definiteness of symmetric pencils". 216 (1995), str. 139–158.

[42] D. Kressner, M. Miloloža Pandur i M. Shao. "An indefinite variant of LOBPCG for definite matrix pencils". *Numer. Algorithms* 66.4 (2014), str. 681–703. ISSN: 1017-1398. DOI: 10.1007/s11075-013-9754-3.

[43] P. Lancaster i L. Rodman. "Canonical forms for Hermitian matrix pairs under strict equivalence and congurence". *SIAM Rev.* 47.3 (2005), str. 407–443.

[44] P. Lancaster i Q. Ye. "Rayleigh-Ritz and Lanczos methods for symmetric matrix pencils". *Linear Algebra Appl.* 185 (1993), str. 173–201. ISSN: 0024-3795. DOI: 10.1016/0024-3795(93)90212-7.

[45] P. Lancaster i Q. Ye. "Variational and numerical methods for symmetric matrix pencils". *Bull. Austral. Math. Soc.* 43.1 (1991), str. 1–17. ISSN: 0004-9727. DOI: 10.1017/S0004972700028732.

[46] I. Lashuk, M. Argentati, E. Ovtchinnikov i A. Knyazev. "Preconditioned eigensolver LOBPCG in hypre and PETSc". *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVI.* Ur. O. Widlund i D. Keyes. Sv. 55. Lect. Notes Comput. Sci. Eng. 2007, str. 635–642. ISBN: 978-3-540-34468-1.

[47] R.-C. Li i Z. Bai. "CS-Technical Report". *UC Davis* (2011).

[48] R.-C. Li i X. Liang. "The Hyperbolic Quadratic Eigenvalue Problem". *Forum of Mathematics, Sigma* 3:e13 (2015). DOI: 10.1017/fms.2015.14.

[49] X. Liang, R.-C. Li i Z. Bai. "Trace minimization principles for positive semi-definite pencils". *Linear Algebra Appl.* 438.7 (2013), str. 3085–3106.

[50] J. Liesen i B.N. Parlett. "On nonsymmetric saddle point matrices that allow conjugate gradient iterations". English. *Numerische Mathematik* 108.4 (2008), str. 605–624. ISSN: 0029-599X. DOI: 10.1007/s00211-007-0131-9.

[51] J. Matejaš i V. Hari. "Quadratic convergence estimate of scaled iterates by J-symmetric Jacobi method". *Linear Algebra Appl.* 417.23 (2006), str. 434–465.

[52] R. Mathias. "Quadratic residual bounds for the Hermitian eigenvalue problem". *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 19.2 (1998), str. 541–550.

[53] S. Miodragović. "Rotacija svojstvenih potprostora perturbiranih matričnih parova s realnim spektrom". Disertacija. Sveučilište u Zagrebu, 2014.

[54] Y.S. Moon. “On the Numerical Solution of the Definite Generalized Eigenvalue Problem”. Disertacija. University of Toronto, Toronto, Canada, 1979.

[55] I. Nakić i K. Veselić. “Wielandt and Ky-Fan theorem for matrix pairs”. *Linear Algebra Appl.* 369 (2003), str. 77–93.

[56] K. Neymeyr. “A geometric convergence theory for the preconditioned steepest descent iteration”. *SIAM Numer. Anal.* 50.6 (2012), str. 3188–3207.

[57] K. Neymeyr. “A Hierarchy of Preconditioned Eigensolvers for Elliptic Differential Operators”. Habilitation thesis. Mathematisches Institut, Universität Tübingen, 2001.

[58] K. Neymeyr. “On preconditioned eigensolvers and Invert-Lanczos processes”. *SIAM J. Matrix Analysis* 430 (2009), str. 1039–1056.

[59] K. Neymeyr i A.V. Knyazev. “Gradient flow approach to geometric convergence analysis of preconditioned eigensolvers”. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 31(2) (2009), str. 621–628.

[60] K. Neymeyr, E. Ovtchinnikov i M. Zhou. “Convergence analysis of gradient iterations for the symmetric eigenvalue problem”. 32 (2011), str. 443–456.

[61] K. Neymeyr i M. Zhou. “The block preconditioned steepest descent iteration for elliptic operator eigenvalue problems”. *Electron. Trans. Numer. Anal.* 41 (2014), str. 93–108.

[62] V. Niendorf i H. Voss. “Detecting hyperbolic and definite matrix polynomials”. *Linear Algebra Appl.* 432 (2010), str. 1017–1035.

[63] A. M. Ostrowski. “A Quantitative Formulation of Sylvester’s Law of Inertia II”. *Proc. N.A.S.* 46.6 (1960), str. 859–862.

[64] B. N. Parlett. *The Symmetric Eigenvalue Problem*. Sv. 20. Classics in Applied Mathematics. Philadelphia, PA: SIAM, 1998.

[65] B.N. Parlett. “Symmetric matrix pencils”. *J. Comput. Appl. Math.* 38.13 (1991), str. 373–385. ISSN: 0377-0427. DOI: 10.1016/0377-0427(91)90183-K.

[66] P.D. Quillen. “Generalizations of an inverse free Krylov subspace method for the symmetric generalized eigenvalue problem”. Disertacija. University of Kentucky, 2005.

[67] D. Rocca, Z. Bai, R.-C. Li i G. Galli. “A block variational procedure for the iterative diagonalization of non-Hermitian random-phase approximation matrices”. *J. Chem. Phys.* 136.3 (2012). DOI: 10.1063/1.3677667.

[68] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd edition*. Philadelpha, PA: SIAM, 2003.

[69] A. Sameh i Z. Tong. “The trace minimization method for the symmetric generalized eigenvalue problem”. *J. Comput. Appl. Math.* 123.1–2 (2000), str. 155–175. ISSN: 0377-0427. DOI: `http://dx.doi.org/10.1016/S0377-0427(00)00391-5`.

[70] A.H. Sameh i J. A. Wisniewski. “A Trace Minimization Algorithm for the Generalized Eigenvalue Problem”. *SIAM J. Numer. Anal.* 19.6 (1982), str. 1243–1259. DOI: `10.1137/0719089`. eprint: `http://dx.doi.org/10.1137/0719089`.

[71] H.R. Schwarz. “The method of coordinate overrelaxation for $(A - \lambda B)x = 0$”. English. *Numer. Math.* 23.2 (1974), str. 135–151. ISSN: 0029-599X. DOI: `10.1007/BF01459947`.

[72] S. Singer, S. Singer, V. Novaković, Uščumlić A. i V. Dunjko. “Novel Modifications of Parallel Jacobi Algorithms”. *Numer. Alg.* 59 (2012), str. 1–27.

[73] S. Singer, S. Singer, V. Novaković, D. Davidović, K. Bokulić i Uščumlić A. “Three-Level Parallel J-Jacobi Algorithms for Hermitian Matrices”. *Appl. Math. Comput.* (2012), str. 5704–5725.

[74] I. Slapničar. “Accurate Symmetric Eigenreduction by a Jacobi Method”. Disertacija. FernUniversität-Gesamthochschule, Hagen, 1992.

[75] I. Slapničar. “Componentwise analysis of direct factorization of real symmetric and Hermitian matrices”. *Linear Algebra Appl.* 272 (1998), str. 227–275.

[76] I. Slapničar. “Highly accurate symmetric eigenvalue decomposition and hyperbolic SVD”. *Linear Algebra Appl.* 358.13 (2003), str. 387–424.

[77] G. L. G. Sleijpen i H. A. Van Der Vorst. “A Jacobi-Davidson Iteration Method for Linear Eigenvalue Problems”. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 17 (2000), str. 401–425.

[78] G. W. Stewart. *Matrix Algorithms. Vol. I.* Philadelphia, PA: SIAM, 1998.

[79] G. W. Stewart i J.-G. Sun. *Matrix Perturbation Theory.* New York: Academic Press, 1990.

[80] G.W. Stewart. “Perturbation bounds for the definite generalized eigenvalue problem”. *Linear Algebra and Appl.* 23 (1979), str. 69–85.

[81] N. Truhar. “Relative Perturbation Theory for Matrix Spectral Decompositions”. Disertacija. Department of Mathematics, University of Zagreb, 2000.

[82] K. Veselić. “A Jacobi eigenreduction algorithm for definite matrix pairs”. *Numer. Math.* 64.2 (1993), str. 241–269. ISSN: 0029-599X. DOI: `10.1007/BF01388689`.

[83] K. Veselić. *Damped oscillations of linear systems.* Sv. 2023. Lecture Notes in Mathematics. Heidelberg: Springer, 2011, str. xvi+209. ISBN: 978-3-642-21334-2. DOI: `10.1007/978-3-642-21335-9`.

[84] W. C. Waterhouse. “Pairs of Quadratic Forms.” eng. *Inventiones mathematicae* 37 (1976), str. 157–164.

[85] W. C. Waterhouse. “The codimension of singular matrix pairs”. *Linear Algebra Appl.* 57 (1984), str. 227–245.

[86] Y.-H. Au-Yeung. “A theorem on a mapping from a sphere to the circle and the simultaneous diagonalization of two Hermitian matrices”. *Proc. Amer. Math. Soc.* 20 (1969), str. 545–548.

[87] Y.-H. Au-Yeung. “Some theorems on the real pencil and simultaneous diagonalization of two Hermitian bilinear functions”. *Proc. Amer. Math. Soc.* 23 (1969), str. 246–253.

Popis algoritama

Popis tablica

Popis slika

Životopis

Marija Miloloža Pandur, djevojački Miloloža, rođena je 21. ožujka 1985. godine u Osijeku u Hrvatskoj. U Čepinu završava osnovnu školu, a u Osijeku opću gimnaziju. U Osijeku 2003. upisuje dodiplomski studij na Odjelu za matematiku Sveučilišta J.J. Strossmayera u Osijeku. U listopadu 2007. uspješno brani diplomski rad stekavši time visoku stručnu spremu i stručno zvanje profesora matematike i informatike.

Od 1. studenog 2007. zaposlena je kao asistent na Odjelu za matematiku Sveučilišta u Osijeku te upisuje Zajednički sveučilišni poslijediplomski doktorski studij matematike na PMF-u, Zagreb. Kao asistent držala je vježbe iz mnogih kolegija kako na Odjelu tako i na vanjskim fakultetima u Osijeku. Pohađala je nekoliko radionica u sklopu DAAD projekta. Dva puta je sudjelovala na Festivalu znanosti s prezentacijama. Tijekom poslijediplomskog studija održala je dva predavanja na

- Seminaru za numeričku matematiku i znanstveno računanje, Matematički odsjek, Sveučilište u Zagrebu,

čija je članica te jedno predavanje na

- Seminaru za optimizaciju i primjene, Odjel za matematiku, Sveučilište u Osijeku.

2013. započela je znanstvena suradnja s profesorom Danielom Kressnerom, EPFL, Lausanne, Švicarska i kolegom Meiyue Shaom koja je rezultirala zajedničkim radom. Nastavak te suradnje je izrada doktorske disetacije pod mentorstvom profesora Krešimira Veselića sa Fernuniversitäta u Hagenu, Njemačka i profesora Ninoslava Truhara s Odjela za matematiku, Sveučilišta u Osijeku, Hrvatska.

2016. izlagala je na Simpoziju studenata doktorskih studija PMF-a u Zagrebu te na konferenciji Joint DMV and GAMM Annual Meeting u Braunschweigu, Njemačka.

Udana je i ima dvije kćeri.

Bibliografija

Znanstveni radovi:

- D. Kressner, M. Miloloža Pandur, M. Shao, '*An indefinite variant of LOBPCG for definite matrix pencils*', Numer. Algorithms, 66(4):681-703, 2014.
- M. Miloloža Pandur, '*Preconditioned gradient iterations for the eigenproblem of definite matrix pairs*', poslan u časopis ETNA.

Stručni rad:

- M. Miloloža, '*Vedska matematika*', OML 8(1):19–28, 2008.