Санкт - Петербургский государственный университет
Математико - механический факультет

Отчёт по практике №4

Поиск собственных значений методом Якоби

Выполнил: Розыков Б.
451 группа

Санкт - Петербург
2021

1 Предисловие

Задача нахождения собственных значений и собственных векторов матриц является одной из основных задач для многих разделов физики. Совершенно принципиальное значение эта проблема приобрела для механики. А такое понятие, как «диагонализация гамильтониана» (оператора энергии), непосредственным образом связанное с нахождением собственных значений этого оператора, стало неотъемлемым компонентом решения многих прикладных задач.

Метод Якоби, будучи одним из самых первых практических методов диагонализации матриц (в результате его применения находятся как собственные значения, так и собственные векторы исходной матрицы), не потерял своего значения и в настоящее время. И, хотя в распоряжении вычислителя сейчас имеются куда более эффективные алгоритмы, метод Якоби способен вычислять малые собственные числа и отвечающие им собственные векторы с гораздо большей точностью, чем другие методы.

2 Постановка задачи

Хотим получить собственные значения матрицы A. Нахождение характеристического многочлена и его корней может оказаться достаточно трудоемким. Если A – эрмитова матрица, то для нахождения собсвтенных значений можно воспользоваться методом вращений Якоби.

3 Метод вращений Якоби

Так как преобразование подобия не меняет спектра матрицы, тогда можно A свести к диагональному виду при помощи унитарной матрицы V

$$V^T A V = \Lambda \tag{1}$$

Пусть A – вещественная симметричная матрица. Метод заключается в построении последовательности матриц A^k так, чтобы максимально приблизиться к Λ. Построение последовательности происходит следующим образом

$$A^{(k+1)} = V^{(T)}_{i_k j_k}(\varphi_k) A V_{i_k j_k}(\varphi_k) \tag{2}$$

Матрица поворота задается следующим образом

$$V = \begin{pmatrix} 1 &&&&&&&&&&& \\ & \ddots &&&&&&&&&& \\ && 1 &&&&&&&&& \\ &&& \cos\varphi_k &&&& -\sin\varphi_k &&&& \\ &&&& 1 &&&&&&& \\ &&&&& \ddots &&&&&& \\ &&&&&& 1 &&&&& \\ &&& \sin\varphi_k &&&& \cos\varphi_k &&&& \\ &&&&&&&& 1 &&& \\ &&&&&&&&& \ddots && \\ &&&&&&&&&& 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

Приводить матрицу к диагональному виду можно несколькими способами. Мы рассмотрим вариант поиска максимального по модулю наддиаганального элемента матрицы и циклический выбор.

Угол φ_k выбирается по правилу

$$a^{(k+1)}_{i_k j_k} = \frac{a^{(k)}_{j_k j_k} - a^{(k)}_{i_k i_k}}{2} sin(2\varphi) + a^{(k)}_{i_k j_k} cos(2\varphi) = 0 \tag{4}$$

Где i_k и j_k определяются из выбранного максимального по модулю, либо циклически взятого элемента матрицы. После чего вычисляются интересующие нас $cos(\varphi_k)$ и $sin(\varphi_k)$.

4 Описание численного эксперимента

Будем брать симметричную вещественную матрицу и искать ее собственные числа при помощи метода вращений Якоби, реализованного двумя способами обнуления наддиагональных элементов. Так же посмотрим на истинные собственные значения, полученные точным методом. Будем следить за количеством итераций метода Якоби. Выберем точность $1e^{-9}$ для всех тестов. Посмотрим на полученные результаты

5 Тесты

5.1 Тест 1

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 0.9 \\ 5 & 7 & 0.6 \\ 0.9 & 0.6 & 13 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Точный метод дает следующие собственные числа

$$\lambda = \begin{pmatrix} -1.847049401064734 \\ 9.561459268991330 \\ 13.285590132073402 \end{pmatrix} \tag{6}$$

Метод Якоби в варианте с обнулением максимального по модулю недиагонального элемента срабатывает за 7 итераций и дает следующие с.ч.

$$\lambda = \begin{pmatrix} -1.847049401064732 \\ 9.561459268991287 \\ 13.285590132073398 \end{pmatrix} \tag{7}$$

Метод Якоби в варианте с циклическим обнулением недиагональных элементов срабатывает за 9 итераций и дает следующие с.ч.

$$\lambda = \begin{pmatrix} -1.847049401064733 \\ 9.561459268991326 \\ 13.285590132073402 \end{pmatrix} \tag{8}$$

5.2 Тест 2

Возьмем матрицу Гильберта размерностью 6×6

Точный метод дает следующие собственные числа

$$\lambda = \begin{pmatrix} 0.000000108279948 \\ 0.000012570757123 \\ 0.000615748354183 \\ 0.016321521319876 \\ 0.242360870575210 \\ 1.618899858924339 \end{pmatrix} \tag{9}$$

Метод Якоби в варианте с обнулением максимального по модулю недиагонального элемента срабатывает за 45 итераций и дает следующие с.ч.

$$\lambda = \begin{pmatrix} 1.618899858984832 \\ 0.242360870575136 \\ 0.000615749644797 \\ 0.000012570757206 \\ 0.000000108279948 \\ 0.016321521319876 \end{pmatrix} \tag{10}$$

Метод Якоби в варианте с циклическим обнулением недиагональных элементов срабатывает за 60 итерации и дает следующие с.ч.

$$\lambda = \begin{pmatrix} 1.618899858924339 \\ 0.242360870575210 \\ 0.000012570757130 \\ 0.016321521319876 \\ 0.000000108279941 \\ 0.000615748354183 \end{pmatrix} \tag{11}$$

5.3 Тест 3

Возьмем обратную матрицу Гильберта размерностью 10×10
Точный метод дает следующие собственные числа

$$\lambda = \begin{pmatrix} 0.000000000000571 \\ 0.000000000002916 \\ 0.000000000027979 \\ 0.000000000395118 \\ 0.000000007767013 \\ 0.000000211430379 \\ 0.000008136910096 \\ 0.000465671007012 \\ 0.044116104393470 \\ 9.146523247041070 \end{pmatrix} \tag{12}$$

Метод Якоби в варианте с обнулением максимального по модулю недиагонального элемента срабатывает за 177 итераций и дает следующие с.ч.

$$\lambda = \begin{pmatrix} 0.000000000000571 \\ 0.000000000027978 \\ 0.000000000395118 \\ 0.000000211430379 \\ 0.000465671007012 \\ 0.044116104393470 \\ 9.146523247041065 \\ 0.000000000002916 \\ 0.000008136910096 \\ 0.000000007767014 \end{pmatrix} \tag{13}$$

Метод Якоби в варианте с циклическим обнулением недиагональных элементов срабатывает за 360 итерации и дает следующие с.ч.

$$\lambda = \begin{pmatrix} -0.000000000664966 \\ 0.000000000004413 \\ 0.000000000915037 \\ 0.000000007763628 \\ 0.000008136911616 \\ 0.000465671006912 \\ 9.146523247041070 \\ 0.044116104393471 \\ 0.000000211429146 \\ 0.000000000175297 \end{pmatrix} \tag{14}$$

6 Вывод

По полученным результатам можно заключить, что метод вращений Якоби достаточно точно приводит матрицу к диагональному виду. Обнуление посредством выбора максимального по модулю недиагонального элемента срабатывает за меньшее количество итераций.