ЛЕКЦИЯ

Тема: «Численные методы определения собственных значений и собственных векторов матриц» (3 часа)

Постановка задачи.

Дана квадратная матрица $A_{n\times n}$, необходимо определить ее собственные значения $\lambda_k\,(k=1,...n)$ и собственные вектора $V^{(k)}(k=1,...n)$.

Собственные значения определяются из решения алгебраического характеристического уравнения

$$\det\left(A-\lambda E\right)=0, \tag{1}$$

где E - единичная матрица.

В скалярной форме уравнение (1) можно записать

$$\det\begin{pmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & ... & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda & ... & a_{2n} \\ ... & ... & ... & ... \\ a_{n1} & a_{n2} & ... & a_{nn}-\lambda \end{pmatrix}=0. \tag{2}$$

Раскрывая определитель (2) получаем алгебраическое уравнение n-ой степени, которое имеет равно n корней, среди которые могут быть вещественные, комплексно-сопряженные, кратные.

Каждому собственному значению λ_k соответствует собственный вектор $V^{(k)}$, определяемый из решения системы линейных алгебраических уравнений

$$\left(A-\lambda_k E\right)V^{(k)}=0. \tag{3}$$

Причем вектор $V^{(k)}\neq 0$. Собственный вектор определяется с точностью до множителя, так как система (2) однородна и если $V^{(k)}$ собственный вектор, то $\alpha V^{(k)}$, где $\alpha=\text{const}\neq 0$, тоже собственный вектор.

При использовании численных методов рассматривается также матрица собственных векторов

$$V = \begin{pmatrix} V_1^{(1)} & V_1^{(2)} & \dots & V_1^{(n)} \\ V_2^{(1)} & V_2^{(2)} & \dots & V_2^{(n)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ V_n^{(1)} & V_n^{(2)} & \dots & V_n^{(n)} \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Рассмотрим некоторые задачи, которые решаются с помощью определения собственных значений и собственных векторов.

1. Решение дифференциальных уравнений.

В качестве примера рассмотрим систему линейных обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\frac{dx}{dt} = Ax. \tag{5}$$

где A - квадратная матрица $n \times n$, x - n-мерный вектор.

Решение (5) будем искать в виде

$$x = Ve^{\lambda t}. \tag{6}$$

где V - n-мерный вектор, λ - параметр.

Подставим (6) в (5), тогда

$$V\lambda e^{\lambda t} = AVe^{\lambda t} \Rightarrow (A - E\lambda)V = 0. \tag{7}$$

Ненулевое решение системы (5) при $V \neq 0$ будет существовать тогда и только тогда, когда

$$\det(A - E\lambda) = 0. \tag{8}$$

Алгебраическое уравнение имеет равно n корней. Рассмотрим случай, когда среди корней нет кратных. Каждому корню λ_k соответствует вектор, который находится из системы (3), и частное решение системы (5) вида $V_k e^{\lambda_k t}$. Тогда общее решение системы (5) определяется как линейная комбинация частных решений

$$x = \sum_{k=1}^{n} C_k V^{(k)} e^{\lambda_k t}, \tag{9}$$

где C_k - произвольные постоянные.

Собственные значения и собственные вектора матриц требуется определять и при решении более сложных нелинейных дифференциальных уравнений, в частности, при решении дифференциальных уравнений в частных производных.

2. Устойчивость положений равновесия динамических систем.

Для определения устойчивости положений равновесия (неподвижных точек) дифференциальных уравнений используется система в отклонениях относительно этих положений равновесия вида

$$\frac{d\Delta x}{dt} = A\Delta x + Q_2\left(\Delta x\right). \tag{5}$$

где Δx - n-мерный вектор отклонений от положения равновесия, $Q_2\left(\Delta x\right)$ - слагаемые второго порядка и выше по отклонениям Δx, причем $Q_2\left(0\right) = 0$.

Согласно первому методу Ляпунова положение равновесия $\Delta x = 0$ асимптотически устойчиво, если для всех собственных чисел их вещественная часть $\mathrm{Re}\left(\lambda_k\right) < 0$, и не устойчиво, если хотя бы для одного собственного числа $\mathrm{Re}\left(\lambda_k\right) > 0$. Устойчивость положения равновесия означает $\Delta x\left(t\right) \to 0$ при $t \to \infty$.

3. Условие сходимости итерационных алгоритмов.

В качестве примера можно рассмотреть итерационные методы решения СЛАУ $Ax = B$. В этом случае их общая формула имеет вид

$$x^{\left(k+1\right)} = Cx^{\left(k\right)} + F\,. \tag{6}$$

Для сходимости итерационного процесса необходимо и достаточно, чтобы спектральный радиус матрицы C был меньше 1. Спектральный радиус – это наибольшее по модулю собственное число матрицы.

То же самое относится к итерационным алгоритмам решения нелинейных алгебраических уравнений и систем. Там тоже необходимо определять собственные числа матриц, определяющих итерационную процедуру.

Перечисленные задачи не исчерпывают весь перечень задач, где необходимо определять собственные значения и собственные вектора матриц.

Методы решения.

Все методы решения задачи на собственные значения и собственные вектора матриц можно условно разделить на две группы:

1. Методы, основанные на непосредственном решении алгебраических уравнений (2) и (3).
2. Методы, основанные на подобных преобразованиях матриц.

Для решения задачи первым методом сначала производится развертывание определителя (2). Для этого используются специальные алгоритмы. После приведения (2) к полиному n-ой степени определяются его корни с использовании численных методов решения нелинейных уравнений. Такой подход к решению задачи можно использовать для матриц относительно невысокого порядка, поскольку эти методы оказываются неустойчивыми по отношению к погрешностям округления, то есть неизбежно возникающей вычислительной погрешности. Методы, основанные на преобразовании матриц, не имеют этих недостатков и чаще всего используются на практике.

Подобные преобразования матриц.

Определение. Преобразование $P^{-1}AP$, где P - невырожденная матрица ($\det(P) \neq 0$), называется преобразованием подобия.

Основные свойства подобных преобразований.

Свойство 1. При подобных преобразованиях собственные значения не изменяются.

Доказательство.

$$
\begin{aligned}
&\det\left(P^{-1}AP-\lambda E\right)=\det\left(P^{-1}\left(A-\lambda E\right)P\right)= \\
&=\det\left(P^{-1}\right)\det\left(A-\lambda E\right)\det\left(P\right)=0
\end{aligned}.
$$

Так как $\det\left(P^{-1}\right)\neq 0$ и $\det\left(P\right)\neq 0$, то характеристические уравнения исходной и преобразованной систем имеют одинаковые собственные значения.

Свойство 2. При подобном преобразовании $P^{-1}AP$ собственные вектора изменяются следующим образом $V^{(k)}=PV_*^{(k)}\left(k=1,2,...n\right)$, где $V_*^{(k)}$ - собственный вектор преобразованной матрицы

Доказательство.

Для преобразованной матрицы

$$
\left(P^{-1}AP-\lambda_k E\right)V_*^{(k)}=P^{-1}\left(A-\lambda_k E\right)PV_*^{(k)}=0.
$$

Поэтому $V^{(k)}=PV_*^{(k)}\left(k=1,2,...n\right)$.

Свойство 3. Если все собственные вектора $V^{(k)}\left(k=1,2,...n\right)$ линейно независимы, то матрица A приводится к диагональному виду, то есть существует невырожденная матрица P такая, что $P^{-1}AP=D$.

Доказательство.

Имеем для каждого собственного вектора

$\left(A-\lambda_k E\right)V^{(k)}=0\ \left(k=1,2,...n\right)$.

Объединяя все эти СЛАУ в одну систему, получим

$$
\left(A-D\right)V=0\ , \tag{7}
$$

где $DE = D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$, V - матрица собственных векторов (в каждый столбец этой матрицы записывается все собственные вектора по порядку).

Так как собственные вектора линейно независимые, то матрица V не вырождена и обратная ей матрица существует. Тогда, умножая соотношение слева, получим

$$V^{-1}\left(A-D\right)V = V^{-1}AV - V^{-1}DV = 0 \Rightarrow V^{-1}AV = D \ , \qquad (8)$$

Следствие. Если посредством подобных преобразований матрица A приводится к диагональному виду, то на главной диагонали матрицы D стоят собственные значения исходной матрицы A, а матрица преобразований при этом есть матрица ее собственных векторов, то есть $P = V$.

Свойство 4. Если матрица A симметрична, то с помощью подобных преобразований она приводится к диагональному виду [1, 2], причем преобразование подобия можно осуществить с помощью ортогональных матриц (без доказательства).

Определение [1, 2]. Квадратная матрица U с вещественными элементами называется ортогональной, если результат ее умножения U на транспонированную матрицу $UU^* = E$, где E - единичная матрица. Данное определение эквивалентно условию $U^* = U^{-1}$.

Свойство 5. Любая квадратная матрица с помощью подобных преобразований приводится к верхней треугольной форме [1, 2] (без доказательства).

Верхняя треугольная матрица имеет вид

$$A^{\Delta}=\begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & \dots & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix},$$

где знаком $(*)$ отмечены элементы матрицы, которые могут быть отличны от нуля.

Наиболее простыми формами треугольной матрицы, к которым может приведена любая квадратная матрица являются: жорданова нормальная форма и фробениусова нормальная форма [2].

Следствие. Если квадратная матрица с помощью подобных преобразований приведена к верхней треугольной матрице, то на ее главной диагонали стоят собственные значения исходной матрицы, то есть ее характеристический многочлен имеет вид

$$\begin{vmatrix} a_{11}^{\Delta}-\lambda & * & * & * \\ 0 & a_{22}^{\Delta}-\lambda & * & * \\ 0 & 0 & \dots & * \\ 0 & 0 & 0 & a_{nn}^{\Delta}-\lambda \end{vmatrix}=0.$$

Раскрывая этот определить, например, по первой строке, получим

$$\left(a_{11}^{\Delta}-\lambda\right)\left(a_{22}^{\Delta}-\lambda\right)\dots\left(a_{nn}^{\Delta}-\lambda\right)=0,$$

откуда следует приведенное утверждение.

Наиболее простые формы треугольной матрицы, к которым может быть приведена любая квадратная матрица, это: жорданова нормальная форма и фробениусова нормальная форма [2].

Метод вращений (метод Якоби)

Метод вращений это итерационный метод определения собственных значений и собственных векторов симметричных матриц. Итерации в соответствии с методом вращений сходятся к диагональной матрице, то есть если на k -ой итерации получена матрица A_k, то

$$\lim_{k\to\infty} A_k = D \ . \tag{9}$$

Если условие (9) выполняется, то для любого $\forall\delta > 0$ (заданной погрешности) существует $\exists N$ такое, что $\sum_{i\neq j}\left|a_{ij}^{(N)}\right| < \delta$.

Замечание. Однако всегда надо помнить, что условие (9) теоретическое и с точки зрения вычислительной математике нельзя говорить, что заданная погрешность может быть любым малым числом. Если, например, число δ сравнимо с вычислительной погрешностью, которая возникает при расчетах на компьютере, то определение матрицы D с заданной точность проблематично. То есть заданная погрешность δ не может слишком малой и должна быть выбрана рационально.

Алгоритм метода вращений проиллюстрируем на простом примере двумерной симметричной матрицы. Введем в рассмотрение двумерную матрицу вращений

$$U = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}, \tag{10}$$

где φ - угол, который надо определить исходя из приведения матрицы к диагональному виду.

Нетрудно заметить, что матрица (10) является ортогональной, то есть $U^* = U^{-1}$.

Сделаем подобное преобразование двумерной симметричной матрицы

$$U^* A U = U^* \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} U = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{12} & d_{22} \end{pmatrix}. \tag{11}$$

После перемножения получим

$$d_{12} = \left(a_{12}\cos\varphi + a_{22}\sin\varphi\right)\cos\varphi - \left(a_{11}\cos\varphi + a_{12}\sin\varphi\right)\sin\varphi \, . \tag{12}$$

Тогда из условия $d_{12} = 0$ нетрудно получить

$$\mathrm{tg}2\varphi = 2\frac{a_{12}}{a_{11}-a_{22}}. \tag{13}$$

Определяя угол φ из (13) и проводя ортогональное преобразование, получим

$$U^* AU = U^* \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Таким образом, преобразование (14) позволило определить собственные значения исходной матрицы. Кроме того, если (как было доказано выше свойство 3) матрица приведена к диагональному виду, то матрица преобразований и будет матрицей собственных векторов $V = U$, то есть каждый столбец матрицы U есть собственный вектор исходной матрицы.

Формула (13) для обнуления недиагонального элемента обобщается на случай n-мерной матрицы, тогда

$$\mathrm{tg}2\varphi_{ij}^{(k)} = 2\frac{a_{ij}^{(k-1)}}{a_{ii}^{(k-1)} - a_{jj}^{(k-1)}}, \tag{15}$$

которая применяется на k-ой итерации для обнуления элемента $a_{ij}^{(k)}$.

При реализации алгоритма метода в общем случае рекомендуется на каждом шаге итерационного процесса выбирать элемент $a_{ij}^{(k)}$, имеющий наибольший модуль.

Таким образом, для получения матрицы A_k на k-ой итерации необходимо осуществить следующие преобразования

$$U_k^* ... U_2^* U_1^* AU_1 U_2 ... U_k = A_k. \tag{16}$$

Здесь k-ая матрица преобразований имеет вид

$$
U_k = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & \ldots & \ldots & .. & 0 \\
0 & 1 & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\
0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\
0 & \ldots & 0 & \cos\varphi_{ij}^{(k)} & \ldots & -\sin\varphi_{ij}^{(k)} & \ldots & 0 \\
0 & \ldots & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\
0 & \ldots & 0 & \sin\varphi_{ij}^{(k)} & \ldots & \cos\varphi_{ij}^{(k)} & \ldots & 0 \\
0 & \ldots & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & 0 \\
0 & \ldots & 0 & \ldots & \ldots & \ldots & 0 & 1
\end{pmatrix}. \qquad (17)
$$

где положение элементов $\left(-\sin\varphi_{ij}^{(k)}\right)$ и $\left(\sin\varphi_{ij}^{(k)}\right)$ соответствует положениям элементов $a_{ij}^{(k-1)} = a_{ji}^{(k-1)}$ матрицы A_{k-1}, над которой производится подобное преобразование.

После выполнения условия остановки алгоритма $\sum\limits_{i \neq j} \left| a_{ij}^{(N)} \right| < \delta$ элементы, стоящие на главой диагонали матрицы A_N, представляют собой оценки для собственных значений исходной матрицы $\tilde{\lambda}_i = a_{ii}^{(N)}$, $i = 1, 2, \ldots n$. А результирующая матрица преобразований $P_k = U_1 U_2 \ldots U_k$ приближенно равна матрице собственных векторов $\tilde{V} = P_k$ матрицы A.

LR (LU) - алгоритм

Данный алгоритм применяется для определения собственных значений и собственных векторов квадратных невырожденных матриц ($\det A \neq 0$) не обязательно симметричных. Алгоритм основывается на разложении $A = LR$, где L и R - нижняя и верхняя треугольные матрицы. Они имеют следующую структуру

$$L=\begin{pmatrix}1 & 0 & \dots & \dots & 0\\ * & 1 & 0 & \dots & 0\\ * & * & \dots & 0 & 0\\ * & \dots & \dots & 1 & 0\\ * & \dots & * & * & 1\end{pmatrix}. \qquad R=\begin{pmatrix}* & * & \dots & \dots & *\\ 0 & * & * & \dots & *\\ 0 & 0 & \dots & * & *\\ 0 & \dots & \dots & * & *\\ 0 & \dots & 0 & 0 & *\end{pmatrix} \tag{17}$$

где знаком $(*)$ отмечены элементы матрицы, которые могут быть отличны от нуля.

Если проведено разложение $A=LR$, посредством перестановки сомножителей получается матрица подобная исходной. Данное утверждение нетрудно доказать. Для этого преобразованную матрицу $A_1=RL$ умножим слева на $E=L^{-1}L$. Тогда $A_1=L^{-1}LRL=L^{-1}AL$, то есть матрицы A и A_1 подобны. На основании этих преобразований организуется итерационная процедура

$$A=L_1R_1 \Rightarrow A_1=R_1L_1=L_2R_2 \Rightarrow A_2=R_2L_2=L_3R_3 \Rightarrow \dots \tag{18}$$

Преобразования (18) можно представить следующим образом

$$L_k^{-1}\dots L_2^{-1}L_1^{-1}AL_1L_2\dots L_k=A_k \tag{19}$$

Доказано, что итерационный процесс (19) сходится к верхней треугольной матрице [1], то есть

$$\lim_{k\to\infty} A_k=A^{\Delta} \ . \tag{20}$$

Если условие (20) выполняется, то для любого $\forall\delta>0$ (заданной погрешности) существует $\exists N$ такое, что $\sum\limits_{i>j}\left|a_{ij}^{(N)}\right|<\delta$. Здесь $\sum\limits_{i>j}\left|a_{ij}^{(N)}\right|$ означает сумму по модулю всех элементов, стоящих ниже главной диагонали.

Если итерационный процесс в соответствии с заданной погрешностью закончен, то элементы матрицы A_k, стоящие на главной диагонали, есть приближенные оценки искомых собственных значений

$\tilde{\lambda}_i = a_{ii}^{(N)}$, $i = 1, 2, ...n$. Для определения собственных векторов исходной матрицы сначала находят матрицу собственных векторов для преобразованной почти треугольной матрицы из решения СЛАУ

$$\left(A_k - E\tilde{\lambda}_i \right) \tilde{V}_*^{(i)} = 0, \quad i = 1, 2, ...n \tag{21}$$

а потом в соответствии со свойством 2 определяют собственные вектора исходной матрицы

$$\tilde{V}^{(i)} = P_k \tilde{V}_*^{(i)}, \quad \left(i = 1, 2, ...n \right) \tag{22}$$

где $P_k = L_1 L_2 ... L_k$ - результирующая матрица преобразований итерационного процесса.

LR (LU) разложение квадратной матрицы.

Для реализации итерационного процесса (19) необходимо на каждой итерации осуществлять разложение $A = LR$, где матрицы L, R имеют вид (17). Для этого может быть использован, например, метод Гаусса в матричной форме, изложенный в лекции, посвященной решению СЛАУ. В соответствии с этим методом сначала матрица A (или любая матрица A_k на каждом шаге итерационного процесса) может быть приведена к верхней треугольной форме

$$N_{n-1} ... N_2 N_1 A = R. \tag{7}$$

где матрица N_i обнуляет элементы i-ого столбца, стоящие под главной диагональю.

Матрицы N_i определяются следующим образом

$$N_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & ... & ... & ... & .. & 0 \\ 0 & ... & 0 & ... & ... & ... & 0 \\ 0 & 0 & ... & 0 & ... & ... & 0 \\ 0 & ... & 0 & 1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & ... & 0 & -\dfrac{a_{i+1,i}}{a_{i,i}} & ... & 0 & 0 \\ 0 & ... & 0 & ... & 0 & ... & 0 \\ 0 & ... & 0 & -\dfrac{a_{n,i}}{a_{i,i}} & 0 & ... & 1 \end{pmatrix}, \tag{23}$$

причем матрица N_i определяется по элементам предыдущей матрице $N_{i-1}...N_1A$.

Введем матрицу $L^{-1} = N_{n-1}...N_2N_1$ и найдем ей обратную

$$L = \left(N_{n-1}...N_2N_1\right)^{-1} = N_1^{-1}N_2^{-1}...N_n^{-1} \tag{24}$$

Определение обратных матриц N_i^{-1} не представляет трудности, так как для этого надо лишь изменить знаки i-ом столбце для элементов, стоящих ниже главной диагонали, то есть

$$N_i^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & ... & ... & ... & .. & 0 \\ 0 & ... & 0 & ... & ... & ... & 0 \\ 0 & 0 & ... & 0 & ... & ... & 0 \\ 0 & ... & 0 & 1 & 0 & ... & 0 \\ 0 & ... & 0 & \dfrac{a_{i+1,i}}{a_{i,i}} & ... & 0 & 0 \\ 0 & ... & 0 & ... & 0 & ... & 0 \\ 0 & ... & 0 & \dfrac{a_{n,i}}{a_{i,i}} & 0 & ... & 1 \end{pmatrix}. \tag{24}$$

Необходимо отметить, что алгоритм разложения $A = LR$ здесь приведем для случая, когда $a_{i,i} \neq 0$. Для более общего случая алгоритм разложения на множители усложняется [1].

Существуют и другие методы приведения квадратных матриц к верхнему треугольному виду, в частности, построенные на подобных преобразованиях с помощью ортогональных матриц [1].

Использованные источники

1. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. - Москва: Наука, 1984. - 318 с.

2. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц.— 5-е изд.—М.: Физматлит, 2004. — 560 с.