Poznámky k předmětu Numerická lineární algebra I. (přednáška 12)

Michal Merta*

*Katedra aplikované matematiky, VŠB-Technická univerzita Ostrava, e-mail: michal.merta@vsb.cz

1 Mocninná metoda pro hledání dominantního vlastního čísla

V následující kapitole budeme řešit částečný problém vlastních čísel (hledáme největší číslo v absolutní hodnotě).

Definice Buď $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ vlastní čísla čísla matice $\mathsf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Pak λ_1 nazveme dominantním vlastním číslem A, platí-li

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \ldots \geq |\lambda_n|.$$

Vlastní vektor odpovídající dominantnímu vlastnímu číslu se nazývá dominantní vlastní vektor.

K nalezení dominantního vlastního čísla a vektoru můžeme použít mocninnou metodu. Její princip je jednoduchý:

1. Předpokládáme, že A má dominantní vlastní číslo.
2. Zvolíme nenulovou počáteční aproximaci $\boldsymbol{x}^0$ dominantního vlastního vektoru.
3. Vytvoříme posloupnost aproximací ve tvaru

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^1 &= \mathsf{A}\boldsymbol{x}^0 \\
\boldsymbol{x}^2 &= \mathsf{A}\boldsymbol{x}^1 = \mathsf{A}(\mathsf{A}\boldsymbol{x}^0) = \mathsf{A}^2\boldsymbol{x}^0 \\
\boldsymbol{x}^3 &= \mathsf{A}\boldsymbol{x}^2 = \mathsf{A}(\mathsf{A}(\mathsf{A}\boldsymbol{x}^0)) = \mathsf{A}^3\boldsymbol{x}^0 \\
&\vdots \\
\boldsymbol{x}^k &= \mathsf{A}\boldsymbol{x}^{k-1} = \mathsf{A}(\mathsf{A}^{k-1}\boldsymbol{x}^0) = \mathsf{A}^k\boldsymbol{x}^0
\end{aligned}$$

Tato posloupnost při splnění určitých podmínek konverguje k dominantnímu vlastnímu vektoru.

Omezme se v následujícím textu na symetrické reálné matice A. Ty mají n lineárně nezávislých vlastních vektorů a reálná vlastní čísla.

Věta Je-li $\boldsymbol{x}$ vlastní vektor reálné symetrické matice A, pak odpovídající vlastní číslo je dáno výrazem

$$\lambda = \frac{(\mathsf{A}\boldsymbol{x})^T\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}}. \tag{1.1}$$

Důkaz

$$\frac{(\mathsf{A}\boldsymbol{x})^T\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}} = \frac{(\lambda\boldsymbol{x})^T\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}} = \lambda$$

□

Výraz (1.1) nazýváme Rayleighův kvocient.

Věta Buď $\mathsf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ matice s n lineárně nezávislými vlastními vektory a dominantním vlastním číslem. Pak existuje nenulový vektor $\boldsymbol{x}^0$ takový, že posloupnost

$$\mathsf{A}\boldsymbol{x}^0, \mathsf{A}^2\boldsymbol{x}^0\mathsf{A}^3\boldsymbol{x}^0, \ldots, \mathsf{A}^k\boldsymbol{x}^0, \ldots$$

konverguje k násobku dominantního vlastního vektoru A.

Důkaz Předpokládejme, že pro vlastní čísla matice A platí $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \ldots |\lambda_n$. Odpovídající vlastní vektory $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ jsou lineárně nezávislé a tvoří bázi $\mathbb{R}^n$. Zvolme vektor $\boldsymbol{x}^0$ tak, aby koeficient c_1 v lineární kombinaci

$$\boldsymbol{x}^0 = c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_n\boldsymbol{v}_n$$

byl nenulový (pro $c_1 = 0$ nemusí metoda konvergovat). Přenásobme předchozí rovnost maticí A

$$\begin{aligned}
\mathsf{A}\boldsymbol{x}^0 &= \mathsf{A}(c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_n\boldsymbol{v}_n) \\
&= c_1\mathsf{A}\boldsymbol{v}_1 + c_2\mathsf{A}\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_n\mathsf{A}\boldsymbol{v}_n \\
&= c_1\lambda_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\lambda_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_n\lambda_n\boldsymbol{v}_n.
\end{aligned}$$

Odtud

$$\begin{aligned}
\mathsf{A}^k\boldsymbol{x}^0 &= c_1\lambda_1^k\boldsymbol{v}_1 + c_2\lambda_2^k\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_n\lambda_n^k\boldsymbol{v}_n \\
&= \lambda_1^k\left(c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\frac{\lambda_2^k}{\lambda_1^k}\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_n\frac{\lambda_n^k}{\lambda_1^k}\boldsymbol{v}_n\right) \\
&= \lambda_1^k\left(c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k\boldsymbol{v}_2 + \ldots + c_n\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k\boldsymbol{v}_n\right).
\end{aligned}$$

Protože předpokládáme, že λ_1 je v absolutní hodnotě větší než všechna ostatní vlastní čísla, platí

$$\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right| < 1, \ldots, \left|\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right| < 1.$$

Pro $k \to \infty$ tedy výraz $\mathsf{A}^0\boldsymbol{x}^0$ konverguje k $\lambda_1^k c_1\boldsymbol{v}_1$, což je násobek dominantního vlastního vektoru. □

Celý algoritmus je shrnut v následujícím výpisu

function MOCNINNA_METODA(A, $\boldsymbol{x}^0$)
  $\boldsymbol{q}^0 = \frac{\boldsymbol{x}^0}{\|\boldsymbol{x}^0\|}$
  for $k = 1, 2, \ldots$ **do**
    $\boldsymbol{x}^k = \mathsf{A}\boldsymbol{q}^{k-1}$
    $\boldsymbol{q}^k = \frac{\boldsymbol{x}^k}{\|\boldsymbol{x}^k\|}$
    $\lambda = (\boldsymbol{q}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{q}^k \qquad \left(= \frac{(\boldsymbol{x}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}^k}{\|\boldsymbol{x}^k\|^2} = \frac{(\boldsymbol{x}^k)^T\mathsf{A}\boldsymbol{x}^k}{(\boldsymbol{x}^k)^T\boldsymbol{x}^k}\right)$
  end for

end function

Všimněte si, že z důvodu zachování numerické stability vektor v každé iteraci normujeme. V každé iteraci taktéž produkujeme odhad dominantního vlastního čísla pomocí Rayleighova kvocientu. Jednou z možností, jak zvolit ukončovací podmínku, je sledovat normu vektoru $\mathsf{A}\boldsymbol{q}^k - \lambda\boldsymbol{q}^k$. Ta by se měla blížit nule pro $k \to \infty$.

Poznámka Má-li A vlastní čísla $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n$ a odpovídající vlastní vektory $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n$, jak vypadají vlastní čísla a vektory matice $\mathsf{A} - \sigma\mathsf{I}$, kde $\sigma \in \mathbb{R}$? Vyjděme z rovnosti

$$\mathsf{A}\boldsymbol{v}_k = \lambda_k\boldsymbol{v}_k$$

a odečtěme od obou stran σ násobek vlastního vektoru $\boldsymbol{v}_k$:

$$\mathsf{A}\boldsymbol{v}_k - \sigma\mathsf{I}\boldsymbol{v}_k = \lambda_k\boldsymbol{v}_k - \sigma\boldsymbol{v}_k.$$

Vytknutím získáme

$$(\mathsf{A} - \sigma\mathsf{I})\boldsymbol{v}_k = (\lambda_k - \sigma)\boldsymbol{v}_k.$$

Vidíme tedy, že $\boldsymbol{v}_k$ je také vlastním vektorem matice $\mathsf{A} - \sigma\mathsf{I}$. Odpovídajícím vlastním číslem je $\lambda_k - \sigma$.

Tohoto poznatku lze využít k nalezení nejmenšího vlastního čísla λ_n symetrické pozitivně definitní matice A, pokud známe její největší vlastní číslo λ_1. Sestavme matici $\mathsf{B} = \mathsf{A} - \lambda_1\mathsf{I}$. Ta bude mít dle předchozího poznatku vlastní čísla $\lambda_n - \lambda_1, \lambda_{n-1} - \lambda_1, \ldots$. Předpokládejme, že $\lambda_n \neq \lambda_{n-1}$. Protože symetrická pozitivně definitní matice má všechna vlastní čísla kladná (tedy $0 < \lambda_n < \lambda_{n-1} \leq \ldots$), můžeme vlastní čísla matice s takto posunutým spektrem seřadit

$$|\lambda_n - \lambda_1| > |\lambda_{n-1} - \lambda_1| \geq \ldots.$$

Použijeme-li tedy mocninnou metodu na matici $\mathsf{B} = \mathsf{A} - \lambda_1\mathsf{I}$, nalezneme její dominantní vlastní číslo $\hat{\lambda} = \lambda_n - \lambda_1$. Odtud snadno dopočítáme nejmenší vlastní číslo původní matice A:

$$\lambda_n = \hat{\lambda} + \lambda_1.$$

References

[1] Trefethen, L. N, Bau, D. Numerical Linear Algebra. SIAM. 1997.