4.3. Метод вращений Якоби для симметрических матриц

Итерационный метод Якоби был предложен еще в середине 19-го века, однако долгое время не находил применения из-за слишком большого по тем временам объема вычислений. В настоящее время известно большое количество его модификаций, основная идея которых однако остается прежней. Из линейной алгебры известно, что всякая симметрическая матрица A может быть приведена к диагональному виду ортогональным преобразованием подобия

$$V^{1} AV = \Lambda,$$

где Λ – диагональная матрица. При этом для ортогональной матрицы V справедливо условие $V^{1}=V^{*}$, т.е. ортогональное преобразование подобия можно записать в виде

$$V^{*} AV = \Lambda. \qquad (4.4)$$

Последнее условие дает фактически матричное уравнение, которое можно использовать для вычисления элементов матриц V и Λ. Однако метод Якоби использует итерационный процесс, который приводит исходную симметрическую матрицу A к диагональному виду с помощью последовательности *элементарных ортогональных преобразований* (в дальнейшем называемых *вращениями Якоби* или *плоскими вращениями).* Процедура построена таким образом, что на $(k+1)$-ом шаге осуществляется преобразование вида

$$A^{(k)} \to A^{(k+1)} = V^{(k)*} A^{(k)} V^{(k)} = V^{(k)*} \dots V^{(0)*} A^{(0)} V^{(0)} \dots V^{(k)}, \qquad k=0,1,2\dots, \qquad (4.5)$$

где $A^{(0)}= A$, $V^{(k)} = V^{(k)}_{ij}(\varphi)$ — ортогональная матрица, отличающаяся от единичной матрицы только элементами

$$v_{ii}= v_{jj} = \cos\varphi \quad v_{ij} = - v_{ji} = -\sin\varphi \ , \qquad (4.6)$$

значение φ выбирается при этом таким образом, чтобы обратить в 0 наибольший по модулю недиагональный элемент матрицы $A^{(k)}$. Итерационный процесс постепенно приводит к матрице со значениями недиагональных элементов, которыми можно пренебречь, т.е. матрица $A^{(k)}$ все более похожа на диагональную, а диагональная матрица Λ является пределом последовательности $A^{(k)}$ при $k \to \infty$.

Основное достоинство метода Якоби заключается в том, что при выполнении каждого плоского вращения уменьшается сумма квадратов недиагональных элементов; сходимость этой суммы к нулю по мере увеличения числа шагов гарантирует сходимость процесса диагонализации.

Отметим, что, если разложение (4.4) найдено, то легко указать правило нахождения собственных векторов. Действительно, если λ_i - i-й диагональный элемент матрицы Λ , тогда, как известно из линейной алгебры, координаты собственного вектора матрицы A соответствующего собственному значению λ_i совпадают с элементами i-го столбца матрицы V.

Теперь остается указать способ выбора матрицы $V^{(k)} = V^{(k)}_{ij}(\varphi)$ на k-м шаге и доказать сходимость метода.

Итак пусть есть матрица $A^{(k)}$. Найдем в ней максимальный по модулю недиагональный элемент $a_{ij}^{(k)}$. Поскольку матрица симметрическая, то можно считать, что $i<j$. Найдем значение угла поворота $\varphi = \varphi_k$ из условия равенства нулю элемента $a_{ij}^{(k+1)}$ матрицы

$$A^{(k+1)} = V^{(k)*} A^{(k)} V^{(k)}.$$

Положим $B = A^{(k)} V^{(k)}$. Тогда в виду определения матрицы поворота $V^{(k)} = V^{(k)}_{ij}(\varphi)$ элементы всех столбцов матрицы B, кроме i-го и j-го, совпадают с элементами матрицы $A^{(k)}$. Для элементов i-го и j-го столбцов имеем

$$\begin{aligned} b_{si} &= a_{si}^{(k)} \cos\varphi_k + a_{sj}^{(k)} \sin\varphi_k, \\ b_{sj} &= -a_{si}^{(k)} \sin\varphi_k + a_{sj}^{(k)} \cos\varphi_k, \quad s = 1, 2, ..., n. \end{aligned} \tag{4.7}$$

Аналогично матрица $A^{(k+1)} = V^{(k)*}B$ во всех строках, кроме i-ой и j-ой, имеет те же элементы, что и B. Элементы i-ой и j-ой строк имеют вид

$$\begin{aligned} a_{is}^{(k+1)} &= b_{is} \cos\varphi_k + b_{js} \sin\varphi_k, \\ a_{js}^{(k+1)} &= -b_{is} \sin\varphi_k + b_{js} \cos\varphi_k, \quad s = 1, 2, ..., n. \end{aligned} \tag{4.8}$$

Обратим внимание, что матрицы $A^{(k+1)}$ и $A^{(k)}$ различаются только суммой

$$[a_{is}^{(k+1)}]^2 + [a_{js}^{(k+1)}]^2 = b_{is}^2 + b_{js}^2 = [a_{is}^{(k)}]^2 + [a_{js}^{(k)}]^2$$

С учетом равенства $a_{ij}^{(k)} = a_{ji}^{(k)}$ из формул (4.7) и (4.8) получим

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(k+1)} &= b_{ij} \cos\varphi_k + b_{jj} \sin\varphi_k = \\ &= (-a_{ii}^{(k)} \sin\varphi_k + a_{ij}^{(k)} \cos\varphi_k)\cos\varphi_k + (-a_{ji}^{(k)} \sin\varphi_k + a_{jj}^{(k)} \cos\varphi_k)\sin\varphi_k = \\ &= a_{ij}^{(k)} \cos 2\varphi_k + \frac{1}{2}(a_{jj}^{(k)} - a_{ii}^{(k)})\sin 2\varphi_k, \end{aligned} \tag{4.9}$$

Полагая в (4.9) $a_{ij}^{(k+1)} = 0$, получим

$$tg 2\varphi_k = 2a_{ij}^{(k)} / (a_{ii}^{(k)} - a_{jj}^{(k)}) \quad (-\pi/4 < \varphi_k < \pi/4)$$

или

$$\cos\varphi_k = \sqrt{\frac{1}{2}(1 + (1 + p_k^2))^{-1/2}}, \quad \sin\varphi_k = \operatorname{sgn} p_k \sqrt{\frac{1}{2}(1 - (1 + p_k^2))^{-1/2}}, \tag{4.10}$$

где

$$p_k = 2a_{ij}^{(k)} / (a_{ii}^{(k)} - a_{jj}^{(k)}).$$

Обозначим через $t(A)$ сумму квадратов всех недиагональных элементов матрицы A. Тогда

$$\begin{aligned} t(A^{(k+1)}) &= t(A^{(k)}) - 2[a_{ij}^{(k)}]^2 + \frac{1}{2}[(a_{jj}^{(k)} - a_{ii}^{(k)})\sin 2\varphi_k + 2a_{ij}^{(k)} \cos 2\varphi_k]^2 = \\ &= t(A^{(k)}) - 2[a_{ij}^{(k)}]^2 + \frac{1}{2}[2a_{ij}^{(k+1)}]^2 = t(A^{(k)}) - 2[a_{ij}^{(k)}]^2. \end{aligned} \tag{4.11}$$

Таким образом, значение функции $t(A)$ уменьшается на каждом шаге.

Покажем, что итерационный процесс в методе Якоби сходится. Действительно, в силу выбора элемента $a_{ij}^{(k)}$ справедлива оценка

$$t(A^{(k)}) \le n(n-1)[a_{ij}^{(k)}]^2,$$

откуда

$$[a_{ij}^{(k)}]^2 \ge t(A^{(k)}) / n(n-1).$$

С учетом этого неравенства из формулы (4.11) получаем

$$t(A^{(k+1)}) = t(A^{(k)}) - 2[a_{ij}^{(k)}]^2 \le t(A^{(k)}) - \frac{2t(A^{(k)})}{n(n-1)} = qt(A^{(k)}) \ ,$$

где

$$q = 1 - \frac{2}{n(n-1)}.$$

Очевидно, что $0<q<1$ при порядке матрицы n>2. Таким образом, получаем

$$t(A^{(k)}) \le q^k t(A^{(0)}) \quad k = 1, 2, ... \ .$$

Последнее означает, что

$$\lim_{k \to \infty} t(A^{(k)}) = 0$$

и, следовательно, итерационный процесс сходится.

В итоге получаем следующий алгоритм метода вращений:

1) в матрице $A^{(k)}$ $(k=0,1,2,....)$ среди всех недиагональных элементов выбираем максимальный по абсолютной величине элемент, стоящий выше главной диагонали; определяем его номера i и j строки и столбца, в которых он стоит (если максимальных элементов несколько, можно взять любой из них);

2) по формулам (4.10) вычисляем $\cos\varphi_k$ и $\sin\varphi_k$, далее используя формулы (4.7) и (4.8) находим элементы матрицы $A^{(k+1)}$;

3) итерационный процесс останавливаем, когда в пределах принятой точности величиной $t(A^{(k+1)})$ можно пренебречь;

4) в качестве собственных значений матрицы A берем диагональные элементы матрицы $A^{(k+1)}$, в качестве собственных векторов – соответствующие столбцы матрицы

$$V= V^{(0)} V^{(1)} \dots V^{(k)}.$$