

1.2. Численные методы решения задач на собственные значения и собственные векторы матриц

1.2.1. Основные определения и спектральные свойства матриц

Рассмотрим матрицу $A_{n \times n}$ в n -мерном вещественном пространстве R^n векторов

$$x = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n)^T.$$

1. Собственным вектором x матрицы A называется *ненулевой* вектор ($x \neq 0$), удовлетворяющий равенству

$$Ax = \lambda x, \quad (1.21)$$

где λ - собственное значение матрицы A , соответствующее рассматриваемому собственному вектору.

2. Собственные значения матрицы A с действительными элементами могут быть вещественными различными, вещественными кратными, комплексными попарно сопряженными, комплексными кратными.

3. Классический способ нахождения собственных значений и собственных векторов известен и заключается в следующем:

для однородной СЛАУ, полученной из (1.21)

$$(A - \lambda E)x = 0, \quad 0 = (0 \ 0 \ \dots \ 0)^T$$

ненулевые решения ($x \neq 0$, а именно такие решения и находятся) имеют место при

$$\det(A - \lambda E) = 0, \quad (1.22)$$

причем уравнение (1.22) называют *характеристическим уравнением*, а выражение в левой части - *характеристическим многочленом*;

каким-либо способом находят решения $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ алгебраического уравнения (1.22) n -й степени (предположим, что они вещественны и различны);

решая однородную СЛАУ (1.22) для различных собственных значений λ_j , $j = \overline{1, n}$,

$$(A - \lambda_j E)x^j = 0, \quad j = \overline{1, n},$$

получаем линейно независимые собственные векторы x^j , $j = \overline{1, n}$, соответствующие собственным значениям λ_j , $j = \overline{1, n}$.

4. Попарно различным собственным значениям соответствуют линейно независимые собственные векторы; k -кратному корню характеристического уравнения (2.79), построенного для произвольной матрицы $A_{n \times n}$, соответствует не более k ($\leq k$) линейно независимых собственных векторов. Если количество линейно независимых собственных векторов матрицы $A_{n \times n}$ совпадает с размерностью пространства R^n , то их можно принять за новый базис, в котором матрица $A_{n \times n}$ примет диагональный вид

$$\Lambda = U^{-1} \cdot A \cdot U, \quad (1.23)$$

на главной диагонали которой находятся собственные значения, а столбцы матрицы преобразования U являются собственными векторами матрицы A (матрицы Λ и A , удовлетворяющие равенству (1.23), называются *подобными*). Собственные значения *подобных матриц* Λ и A совпадают.

5. Симметрическая матрица A ($A = A^T$) имеет полный спектр λ_j , $j = \overline{1, n}$ вещественных собственных значений; положительно определенная симметрическая матрица ($A = A^T$, $(Ax, x) > 0$) имеет полный спектр вещественных положительных собственных значений; k -кратному корню характеристического уравнения (2.79) симметрической матрицы соответствует ровно k линейно независимых собственных векторов; симметрическая матрица имеет ровно n ортогональных собственных векторов, приняв которые за новый базис (т.е. построив матрицу преобразования U , взяв в качестве ее столбцов координатные столбцы собственных векторов), можно преобразовать симметрическую матрицу A к диагональному виду с помощью преобразования (1.23); для симметрической матрицы A матрица преобразования U в (1.23) является ортогональной $U^{-1} = U^T$ и, следовательно, преобразование (1.23) имеет вид

$$\Lambda = U^T \cdot A \cdot U. \quad (1.24)$$

1.2.2. Метод вращений Якоби численного решения задач на собственные значения и собственные векторы матриц

Метод вращений Якоби применим только для симметрических матриц $A_{n \times n}$ ($A = A^T$) и решает полную проблему собственных значений и собственных векторов таких матриц. Он основан на отыскании с помощью итерационных процедур матрицы U в преобразовании подобия $\Lambda = U^{-1}AU$, а поскольку для симметрических матриц A матрица преобразования подобия U является ортогональной ($U^{-1} = U^T$), то $\Lambda = U^T AU$, где Λ - диагональная матрица с собственными значениями на главной диагонали

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \dots & 0 \\ \dots & 0 & \dots \\ 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}.$$

Пусть дана симметрическая матрица A . Требуется для нее вычислить с точностью ε все собственные значения и соответствующие им собственные векторы. Алгоритм метода вращения следующий:

Пусть известна матрица $A^{(k)}$ на k -й итерации, при этом для $k=0$ $A^{(0)} = A$.

1. Выбирается максимальный по модулю недиагональный элемент $a_{ij}^{(k)}$ матрицы $A^{(k)}$ ($|a_{ij}^{(k)}| = \max_{l < m} |a_{lm}^{(k)}|$).

2. Ставится задача найти такую ортогональную матрицу $U^{(k)}$, чтобы в результате преобразования подобия $A^{(k+1)} = U^{(k)T} A^{(k)} U^{(k)}$ произошло обнуление элемента $a_{ij}^{(k+1)}$ матрицы $A^{(k+1)}$. В качестве ортогональной матрицы выбирается матрица вращения, имеющая следующий вид:

$$U^k = \begin{pmatrix} & i & j & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ 1 & M & M & & \\ & O & M & M & 0 \\ & & 1 & M & \\ \Lambda \Lambda \Lambda \Lambda \cos \varphi^{(k)} \Lambda \Lambda - \sin \varphi^{(k)} \Lambda \Lambda \Lambda & i & \\ & M & 1 & M & \\ & M & O & M & \\ & M & & 1 & M \\ \Lambda \Lambda \Lambda \Lambda \sin \varphi^{(k)} \Lambda \Lambda \cos \varphi^{(k)} \Lambda \Lambda \Lambda & j & \\ & M & & M & 1 \\ & 0 & M & M & O \\ & & M & M & 1 \end{pmatrix},$$

В матрице вращения на пересечении i -й строки и j -го столбца находится элемент $u_{ij}^{(k)} = -\sin \varphi^{(k)}$, где $\varphi^{(k)}$ - угол вращения, подлежащий определению. Симметрично относительно главной диагонали (j -я строка, i -й столбец) расположен элемент $u_{ji}^{(k)} = \sin \varphi^{(k)}$; Диагональные элементы $u_{ii}^{(k)}$ и $u_{jj}^{(k)}$ равны соответственно $u_{ii}^{(k)} = \cos \varphi^{(k)}$, $u_{jj}^{(k)} = \cos \varphi^{(k)}$; другие диагональные элементы $u_{mm}^{(k)} = 1, m = \overline{1, n}, m \neq i, m \neq j$; остальные элементы в матрице вращения $U^{(k)}$ равны нулю.

Угол вращения $\varphi^{(k)}$ определяется из условия $a_{ij}^{(k+1)} = 0$:

$$\varphi^{(k)} = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{2a_{ij}^{(k)}}{a_{ii}^{(k)} - a_{jj}^{(k)}},$$

причем если $a_{ii}^{(k)} = a_{jj}^{(k)}$, то $\varphi^{(k)} = \frac{\pi}{4}$.

3. Строится матрица $A^{(k+1)}$

$$A^{(k+1)} = U^{(k)T} A^{(k)} U^{(k)},$$

в которой элемент $a_{ij}^{(k+1)} \approx 0$.

В качестве критерия окончания итерационного процесса используется условие малости суммы квадратов внедиагональных элементов:

$$t(A^{(k+1)}) = \left(\sum_{l,m; l < m} (a_{lm}^{(k+1)})^2 \right)^{1/2}.$$

Если $t(A^{(k+1)}) > \varepsilon$, то итерационный процесс

$$A^{(k+1)} = U^{(k)T} A^{(k)} U^{(k)} = U^{(k)T} U^{(k-1)T} \dots U^{(0)T} A^{(0)} U^{(0)} U^{(1)} \dots U^{(k)}$$

продолжается. Если $t(A^{(k+1)}) < \varepsilon$, то итерационный процесс останавливается, и в качестве искомых собственных значений принимаются $\lambda_1 \approx a_{11}^{(k+1)}, \lambda_2 \approx a_{22}^{(k+1)}, \dots, \lambda_n \approx a_{nn}^{(k+1)}$.

Координатными столбцами собственных векторов матрицы A в единичном базисе будут столбцы матрицы $U = U^{(0)} U^{(1)} \dots U^{(k)}$, т.е.

$$(x^1)^T = (u_{11} \ u_{21} \ \dots \ u_{n1}), \quad (x^2)^T = (u_{12} \ u_{22} \ \dots \ u_{n2}), \quad (x^n)^T = (u_{1n} \ u_{2n} \ \dots \ u_{nn}),$$

причем эти собственные векторы будут ортогональны между собой, т.е. $(x^l, x^m) \approx 0, l \neq m$.

Пример 1.7. С точностью $\varepsilon = 0,3$ вычислить собственные значения и собственные векторы матрицы

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 3 \\ 1 & 3 & 6 \end{bmatrix} \equiv A^{(0)}.$$

Решение.

1). Выбираем максимальный по модулю внедиагональный элемент матрицы $A^{(0)}$, т.е. находим $a_{ij}^{(0)}$, такой что $|a_{ij}^{(0)}| = \max_{l < m} |a_{lm}^{(0)}|$. Им является элемент $a_{23}^{(0)} = 3$.

2). Находим соответствующую этому элементу матрицу вращения:

$$U^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi^{(0)} & -\sin \varphi^{(0)} \\ 0 & \sin \varphi^{(0)} & \cos \varphi^{(0)} \end{bmatrix}; \varphi^{(0)} = \frac{1}{2} \arctg \frac{2 \cdot 3}{5 - 6} =$$

$$= -0,7033; \sin \varphi^{(0)} = -0,65; \cos \varphi^{(0)} = 0,76;$$

$$U^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0,76 & 0,65 \\ 0 & -0,65 & 0,76 \end{bmatrix}; .$$

3). Вычисляем матрицу $A^{(1)}$:

$$A^{(1)} = U^{(0)T} A^{(0)} U = \begin{bmatrix} 4 & 0,87 & 2,06 \\ 0,87 & 2,46 & -0,03 \\ 2,06 & -0,03 & 8,54 \end{bmatrix}.$$

В полученной матрице с точностью до ошибок округления элемент $a_{23}^{(1)} = 0$.

$$t(A^{(1)}) = \left(\sum_{l, m; l < m} (a_{lm}^{(1)})^2 \right)^{1/2} = (0,87^2 + 2,06^2 + (-0,03)^2)^{1/2} > \varepsilon, \text{ следовательно}$$

итерационный процесс необходимо продолжить.

Переходим к следующей итерации ($k = 1$):

$$a_{13}^{(1)} = 2,06; \left(|a_{13}^{(1)}| = \max_{l, m; l < m} |a_{lm}^{(1)}| \right).$$

$$U^{(1)} = \begin{bmatrix} \cos \varphi^{(1)} & 0 & -\sin \varphi^{(1)} \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \varphi^{(1)} & 0 & \cos \varphi^{(1)} \end{bmatrix};$$

$$\varphi^{(1)} = \frac{1}{2} \arctg \frac{2 \cdot 2,06}{4 - 8,54} = -0,3693; \sin \varphi^{(1)} = -0,361; \cos \varphi^{(1)} = 0,933;$$

$$U^{(1)} = \begin{bmatrix} 0,933 & 0 & 0,361 \\ 0 & 1 & 0 \\ -0,361 & 0 & 0,933 \end{bmatrix}; A^{(2)} = U^{(1)T} A^{(1)} U^{(1)} = \begin{bmatrix} 3,19 & 0,819 & 0,005 \\ 0,819 & 2,46 & 0,28 \\ 0,005 & 0,28 & 9,38 \end{bmatrix}.$$

$$t(A^{(2)}) = \left(\sum_{l, m; l < m} (a_{lm}^{(2)})^2 \right)^{1/2} = (0,819^2 + 0,28^2 + 0,005^2)^{1/2} > \varepsilon.$$

Переходим к следующей итерации ($k = 2$)

$$a_{12}^{(2)} = 0,819; \left(|a_{12}^{(2)}| = \max_{l, m; l < m} |a_{lm}^{(2)}| \right)$$

$$\varphi^{(2)} = \frac{1}{2} \operatorname{actg} \frac{2 \cdot 0,819}{3,19 - 2,46} = 0,5758; \sin \varphi^{(2)} = 0,5445; \cos \varphi^{(2)} = 0,8388.$$

$$U^{(2)} = \begin{bmatrix} 0,8388 & -0,5445 & 0 \\ 0,5445 & 0,8388 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}; A^{(3)} = U^{(2)T} A^{(2)} U^{(2)} = \begin{bmatrix} 3,706 & 0,0003 & 0,1565 \\ 0,0003 & 1,929 & 0,232 \\ 0,1565 & 0,232 & 9,38 \end{bmatrix};$$

$$t(A^{(3)}) = (0,0003^2 + 0,1565^2 + 0,232^2)^{1/2} = 0,07839^{1/2} < \varepsilon.$$

Таким образом в качестве искоемых собственных значений могут быть приняты диагональные элементы матрицы $A^{(3)}$:

$$\lambda_1 \approx 3,706; \lambda_2 \approx 1,929; \lambda_3 \approx 9,38.$$

Собственные векторы определяются из произведения

$$U^{(0)} U^{(1)} U^{(2)} = \begin{bmatrix} 0,78 & -0,5064 & 0,361 \\ 0,2209 & 0,7625 & 0,6 \\ -0,58 & -0,398 & 0,7 \end{bmatrix}; x^1 = \begin{bmatrix} 0,78 \\ 0,2209 \\ -0,58 \end{bmatrix}; x^2 = \begin{bmatrix} -0,5064 \\ 0,7625 \\ -0,398 \end{bmatrix}; x^3 = \begin{bmatrix} 0,361 \\ 0,6 \\ 0,7 \end{bmatrix}.$$

Полученные собственные векторы ортогональны в пределах заданной точности, т.е. $(x^1, x^2) = -0,00384$; $(x^1, x^3) = 0,0081$; $(x^2, x^3) = -0,0039$.

1.2.3. Частичная проблема собственных значений и собственных векторов матрицы. Степенной метод

Рассмотренный метод вращения решает полную проблему собственных значений и собственных векторов матриц (симметрических) в том смысле, что определяются все собственные значения и собственные векторы.

Зачастую не нужно находить все собственные значения (спектр) и все собственные векторы, а необходимо найти максимальное и минимальное из них. Существует степенной метод по определению спектрального радиуса матрицы, т.е. максимального собственного значения матрицы, и соответствующего ему собственного вектора.

Пусть дана матрица A и пусть ее собственные значения упорядочены по абсолютным величинам:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n| \quad (1.25)$$

которого равны единице $y^{(0)} = (1 \ 1 \dots 1)^T$, можно для определения λ_1 построить следующий итерационный процесс:

$$\begin{aligned} y^{(1)} &= Ay^{(0)}, \quad \lambda_1^{(1)} = \frac{y_j^{(1)}}{y_j^{(0)}} \\ y^{(2)} &= Ay^{(1)}, \quad \lambda_1^{(2)} = \frac{y_j^{(2)}}{y_j^{(1)}}; \\ &\dots\dots\dots \\ y^{(k)} &= Ay^{(k-1)}, \quad \lambda_1^{(k)} = \frac{y_j^{(k)}}{y_j^{(k-1)}}; \end{aligned} \tag{1.26}$$

где $y_j^{(k-1)}$, $y_j^{(k)}$ - соответствующие компоненты векторов $y^{(k-1)}$, $y^{(k)}$. При этом в качестве номера j может использоваться любое число из диапазона $j = \overline{1, n}$.

В связи с тем, что вектор $y^{(k)}$ на k -ой итерации может быть представлен в виде $y^{(k)} = Ay^{(k-1)} = A^k y^{(0)}$, рассматриваемый итерационный процесс носит название "степенной метод". При выполнении условий (1.25) итерационный процесс сходится к искомому собственному значению λ_1 и соответствующему собственному вектору, причем скорость сходимости определяется отношением $\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}$ (чем оно меньше, тем выше скорость сходимости).

В качестве критерия завершения вычислений используется следующее условие:

$$\varepsilon^{(k)} = \left| \lambda_1^{(k)} - \lambda_1^{(k-1)} \right| \leq \varepsilon, \text{ где } \varepsilon - \text{ задаваемая вычислителем точность расчета.}$$

Пример 1.8.

Вычислить спектральный радиус матрицы $A = \begin{pmatrix} 5 & 1 & 2 \\ 1 & 4 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}$ с точностью $\varepsilon = 0,1$.

В качестве начального приближения собственного вектора возьмем $y^{(0)} = (111)^T$.

Реализуем итерационный процесс (2.90), полагая $j = 1$.

$$\begin{aligned} y^{(1)} &= Ay^{(0)} = \begin{pmatrix} 8 & 6 & 6 \end{pmatrix}^T, \quad \lambda_1^{(1)} = \frac{y_1^{(1)}}{y_1^{(0)}} = \frac{8}{1} = 8; \\ y^{(2)} &= Ay^{(1)} = \begin{pmatrix} 58 & 38 & 40 \end{pmatrix}^T, \quad \lambda_1^{(2)} = \frac{y_1^{(2)}}{y_1^{(1)}} = \frac{58}{8} = 7,25; \\ \varepsilon^{(2)} &= \left| \lambda_1^{(2)} - \lambda_1^{(1)} \right| = 0,75 > \varepsilon; \end{aligned}$$

$$y^{(3)} = Ay^{(2)} = (480 \ 250 \ 274)^T, \quad \lambda_1^{(3)} = \frac{y_1^{(3)}}{y_1^{(2)}} = \frac{480}{58} = 7,034;$$

$$\varepsilon^{(3)} = |\lambda_1^{(3)} - \lambda_1^{(2)}| = 0,216 > \varepsilon;$$

$$y^{(4)} = Ay^{(3)} = (2838 \ 1682 \ 1888)^T, \quad \lambda_1^{(4)} = \frac{y_1^{(4)}}{y_1^{(3)}} = \frac{2838}{408} = 6,9559;$$

$$\varepsilon^{(4)} = |\lambda_1^{(4)} - \lambda_1^{(3)}| = 0,078 < \varepsilon.$$

Таким образом, полученное на 4-ой итерации значение $\lambda_1^{(4)} = 6,9559$ удовлетворяет заданной точности и может быть взято в качестве приближенного значения λ_1 . Искомое значение спектрального радиуса $\rho(A) = \max_i |\lambda_i| = |\lambda_1| = 6,9559$.

Рассмотренный выше пример наглядно иллюстрирует существенный недостаток алгоритма (1.26), связанный с сильным возрастанием компонентов итерированного вектора $y^{(k)}$ в ходе итерационного процесса. Видно, что $\left| \frac{y_j^{(k)}}{y_j^{(k-1)}} \right| \approx |\lambda_1|$.

Во избежание неограниченного возрастания (при $|\lambda_1| > 1$) или убывания (при $|\lambda_1| < 1$) компонентов $y^{(k)}$ по мере увеличения числа итераций k обычно при проведении компьютерных расчетов применяется степенной метод с нормировкой итерированного вектора. С этой целью алгоритм (2.89) модифицируется следующим образом:

$$z^{(k)} = Ay^{(k-1)}, \quad \lambda_1^{(k)} = \frac{z_j^{(k)}}{y_j^{(k-1)}}, \quad y^{(k)} = \frac{z^{(k)}}{\|z^{(k)}\|} \quad (1.27)$$

При этом в качестве начального приближения $y^{(0)}$ берется вектор с единичной нормой.

Широко распространена также версия степенного метода, использующая скалярные произведения [2]:

$$z^{(k)} = Ay^{(k-1)}, \quad y^{(k)} = \frac{z^{(k)}}{\|z^{(k)}\|}, \quad \lambda_1^{(k)} = (y^{(k)}, Ay^{(k)}) \quad (1.28)$$

ЗАДАЧИ

Используя степенной метод, с точностью $\varepsilon = 0,1$ оценить спектральный радиус симметрических матриц, заданных в разделе 1.2.2. Сравнить значение λ_1 и соответствующий ему собственный вектор с результатами, полученными в разделе 1.2.2. методом вращений.

1.2.4. QR-алгоритм нахождения собственных значений матриц

При решении полной проблемы собственных значений для несимметричных матриц эффективным является подход, основанный на приведении матриц к подобным, имеющим треугольный или квазитреугольный вид. Одним из наиболее распространенных методов этого класса является QR-алгоритм, позволяющий находить как вещественные, так и комплексные собственные значения.

В основе QR-алгоритма лежит представление матрицы в виде $A = QR$, где Q - ортогональная матрица ($Q^{-1} = Q^T$), а R - верхняя треугольная. Такое разложение существует для любой квадратной матрицы. Одним из возможных подходов к построению QR разложения является использование преобразования Хаусхолдера, позволяющего обратить в нуль группу поддиагональных элементов столбца матрицы.

Преобразование Хаусхолдера осуществляется с использованием матрицы Хаусхолдера, имеющей следующий вид:

$$H = E - \frac{2}{v^T v} v v^T, \quad (1.29)$$

где v - произвольный ненулевой вектор-столбец, E - единичная матрица, $v v^T$ - квадратная матрица того же размера.

Легко убедиться, что любая матрица такого вида является симметричной и ортогональной. При этом произвол в выборе вектора v дает возможность построить матрицу, отвечающую некоторым дополнительным требованиям.

Рассмотрим случай, когда необходимо обратить в нуль все элементы какого-либо вектора кроме первого, т.е. построить матрицу Хаусхолдера такую, что

$$\tilde{b} = Hb, \quad b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T, \quad \tilde{b} = (\tilde{b}_1, 0, \dots, 0)^T.$$

Тогда вектор v определится следующим образом:

$$v = b + \text{sign}(b_1) \|b\|_2 e_1, \quad (1.30)$$

где $\|b\|_2 = \left(\sum_i b_i^2 \right)^{1/2}$ - евклидова норма вектора, $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$.

Применяя описанную процедуру с целью обнуления поддиагональных элементов каждого из столбцов исходной матрицы, можно за фиксированное число шагов получить ее QR – разложение.

Рассмотрим подробнее реализацию данного процесса.

Положим $A_0 = A$ и построим преобразование Хаусхолдера H_1 ($A_1 = H_1 A_0$), переводящее матрицу A_0 в матрицу A_1 с нулевыми элементами первого столбца под главной диагональю:

$$A_0 = \begin{pmatrix} a_{11}^0 & a_{12}^0 & \dots & a_{1n}^0 \\ a_{21}^0 & a_{22}^0 & \dots & a_{2n}^0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1}^0 & a_{n2}^0 & \dots & a_{nn}^0 \end{pmatrix} \xrightarrow{H_1} A_1 = \begin{pmatrix} a_{11}^1 & a_{12}^1 & \dots & a_{1n}^1 \\ 0 & a_{22}^1 & \dots & a_{2n}^1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & a_{n2}^1 & \dots & a_{nn}^1 \end{pmatrix}$$

Ясно, что матрица Хаусхолдера H_1 должна определяться по первому столбцу матрицы A_0 , т.е в качестве вектора b в выражении (1.30) берется вектор $(a_{11}^0, a_{21}^0, \dots, a_{n1}^0)^T$. Тогда компоненты вектора v вычисляются следующим образом:

$$v_1^1 = a_{11}^0 + \text{sign}(a_{11}^0) \left(\sum_{j=1}^n (a_{j1}^0)^2 \right)^{1/2},$$

$$v_i^1 = a_{i1}^0, \quad i = \overline{2, n}.$$

Матрица Хаусхолдера H_1 вычисляется согласно (1.29):

$$H_1 = E - 2 \frac{v^1 v^{1T}}{v^{1T} v^1}.$$

На следующем, втором, шаге рассматриваемого процесса строится преобразование Хаусхолдера H_2 ($A_2 = H_2 A_1$), обнуляющее расположенные ниже главной диагонали элементы второго столбца матрицы A_1 . Взяв в качестве вектора b вектор $(a_{22}^1, a_{32}^1, \dots, a_{n2}^1)^T$ размерности $n-1$, получим следующие выражения для компонентов вектора v :

$$v_1^2 = 0,$$

$$v_2^2 = a_{22}^1 + \text{sign}(a_{22}^1) \left(\sum_{j=2}^n (a_{j2}^1)^2 \right)^{1/2},$$

$$v_i^2 = a_{i2}^1, \quad i = \overline{3, n}.$$

Повторяя процесс $n-1$ раз, получим искомое разложение $A = QR$, где

$$Q = (H_{n-1}H_{n-2}...H_0)^T = H_1H_2...H_{n-1}, \quad R = A_{n-1}.$$

Следует отметить определенное сходство рассматриваемого процесса с алгоритмом Гаусса. Отличие заключается в том, что здесь обнуление поддиагональных элементов соответствующего столбца осуществляется с использованием ортогонального преобразования.

Процедура QR - разложения многократно используется в QR -алгоритме вычисления собственных значений. Строится следующий итерационный процесс:

$$A^{(0)} = A,$$

$$A^{(0)} = Q^{(0)}R^{(0)} - \text{производится } QR - \text{разложение,}$$

$$A^{(1)} = R^{(0)}Q^{(0)} - \text{производится перемножение матриц,}$$

.....

$$A^{(k)} = Q^{(k)}R^{(k)} - \text{разложение,}$$

$$A^{(k+1)} = R^{(k)}Q^{(k)} \text{ перемножение.}$$

Таким образом, каждая итерация реализуется в два этапа. На первом этапе осуществляется разложение матрицы $A^{(k)}$ в произведение ортогональной $Q^{(k)}$ и верхней треугольной $R^{(k)}$ матриц, а на втором – полученные матрицы перемножаются в обратном порядке.

Нетрудно показать подобие матриц $A^{(k+1)}$ и $A^{(k)}$. Действительно, учитывая ортогональность $Q^{(k)}$ ($Q^{(k)T}Q^{(k)} = E$), можно записать:

$$A^{(k+1)} = R^{(k)}Q^{(k)} = Q^{(k)T}Q^{(k)}R^{(k)}Q^{(k)} = Q^{(k)T}A^{(k)}Q^{(k)}.$$

Аналогично можно показать, что любая из матриц $A^{(k)}$ ортогонально подобна матрице A .

При отсутствии у матрицы кратных собственных значений последовательность $A^{(k)}$ сходится к верхней треугольной матрице (в случае, когда все собственные значения вещественны) или к верхней квазитреугольной матрице (если имеются комплексно-сопряженные пары собственных значений).

Таким образом, каждому вещественному собственному значению будет соответствовать столбец со стремящимися к нулю поддиагональными элементами и в качестве критерия сходимости итерационного процесса для таких собственных

значений можно использовать следующее неравенство: $\left(\sum_{l=m+1}^n (a_{lm}^{(k)})^2 \right)^{1/2} \leq \varepsilon$. При этом соответствующее собственное значение принимается равным диагональному элементу данного столбца.

Каждой комплексно-сопряженной паре соответствует диагональный блок размерностью 2×2 , т.е. матрица $A^{(k)}$ имеет блочно-диагональную структуру. Принципиально то, что элементы этих блоков изменяются от итерации к итерации без видимой закономерности, в то время как комплексно-сопряженные собственные значения, определяемые каждым блоком, имеют тенденцию к сходимости. Это обстоятельство необходимо учитывать при формировании критерия выхода из итерационного процесса. Если в ходе итераций прослеживается комплексно-сопряженная пара собственных значений, соответствующая блоку, образуемому элементами j -го и $(j+1)$ -го столбцов $a_{jj}^{(k)}, a_{jj+1}^{(k)}, a_{j+1j}^{(k)}, a_{j+1j+1}^{(k)}$, то, несмотря на значительное изменение в ходе итераций самих этих элементов, собственные значения, соответствующие данному блоку и определяемые из решения квадратного уравнения $(a_{jj}^{(k)} - \lambda^{(k)})(a_{j+1j+1}^{(k)} - \lambda^{(k)}) = a_{jj+1}^{(k)} a_{j+1j}^{(k)}$, начиная с некоторого k , отличаются незначительно. В качестве критерия окончания итераций для таких блоков может быть использовано следующее условие $|\lambda^{(k)} - \lambda^{(k-1)}| \leq \varepsilon$.

Замечание. Существенным недостатком рассмотренного выше алгоритма является большое число операций (пропорционально n^3 , где n - размерность матрицы), необходимое для QR - факторизации матрицы на каждой итерации. Эффективность QR - алгоритма может быть повышена, если предварительно с помощью преобразования подобия привести матрицу к верхней Хессенберговой форме, в которой равны нулю все элементы, находящиеся ниже главной диагонали за исключением элементов первой поддиагонали. Иными словами предварительно производится следующая операция:

$$A^{(0)} = H^T A H,$$

где $A^{(0)}$ - матрица Хессенберга, имеющая следующую структуру (знак x обозначает ненулевые элементы):

$$\begin{pmatrix} x & x & x & \dots & x & x \\ x & x & x & \dots & x & x \\ 0 & x & x & \dots & x & x \\ 0 & 0 & x & \dots & x & x \\ \dots & \dots & \dots & \dots & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x & x \end{pmatrix},$$

Здесь принципиально то, что в дальнейшем, в ходе QR -итераций, матрицы $A^{(k)}$ сохраняют верхнюю Хессенбергову форму, что позволяет более экономно проводить их QR -разложение. Подробное изложение данного вопроса можно найти, например, в [2].

Пример 1.9.

Используя преобразование Хаусхолдера, построить QR -разложение матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 4 \\ 4 & 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Решение.

1. Положим $A_0 = A$ и найдем ортогональную матрицу Хаусхолдера H_1 , такую что в матрице $A_1 = H_1 A_0$ все поддиагональные элементы первого столбца равны нулю. С этой целью компоненты вектора v определим, используя элементы первого столбца матрицы A_0 :

$$v_1^1 = a_{11}^0 + \text{sign}(a_{11}^0) \left(\sum_{j=1}^3 (a_{j1}^0)^2 \right)^{1/2} = 1 + (1 + 1 + 4^2)^{1/2} = 5,24,$$

$$v_2^1 = a_{21}^0 = 1,$$

$$v_3^1 = a_{31}^0 = 4.$$

В результате получен вектор $v^1 = (5,24 \quad 1 \quad 4)^T$.

Найдем соответствующую этому вектору матрицу Хаусхолдера:

$$H_1 = E - 2 \frac{v^1 v^{1T}}{v^{1T} v^1} = \begin{pmatrix} -0,24 & -0,24 & -0,94 \\ -0,24 & 0,96 & -0,18 \\ -0,94 & -0,18 & 0,28 \end{pmatrix}.$$

В заключение первого шага вычислим матрицу A_1 :

$$A_1 = H_1 A_0 = \begin{pmatrix} -4,24 & -3,77 & -2,12 \\ 0 & -0,29 & 3,40 \\ 0 & -2,17 & -1,38 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, после первого шага получена матрица с нулевыми поддиагональными элементами в первом столбце.

2. На втором шаге сделаем аналогичную процедуру, обнуляя поддиагональный элемент второго столбца.

$$v_1^2 = 0,$$

$$v_2^2 = a_{22}^1 + \text{sign}(a_{22}^1) \left(\sum_{j=2}^3 (a_{j2}^1)^2 \right)^{1/2} = -0,29 - (0,29^2 + 2,17^2)^{1/2} = -2,48,$$

$$v_3^2 = a_{32}^1 = -2,17.$$

Т.е. искомый вектор $v^2 = (0 \quad -2,48 \quad -2,17)^T$.

Далее найдем соответствующую ему матрицу Хаусхолдера:

$$H_2 = E - 2 \frac{v^2 v^{2T}}{v^{2T} v^2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0,13 & -0,99 \\ 0 & -0,99 & 0,13 \end{pmatrix}$$

и вычислим матрицу A_2 :

$$A_2 = H_2 A_1 = \begin{pmatrix} -4,24 & -3,77 & -2,12 \\ 0 & 2,19 & 0,91 \\ 0 & 0 & -3,56 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, исходная матрица A приведена к верхнему треугольному виду, т.е. получена матрица $R = A_2$ искомого разложения.

Резльтирующая ортогональная матрица преобразования Q получается в результате перемножения матриц $H_i, i = 1, 2$:

$$Q = H_1 H_2 = \begin{pmatrix} -0,24 & 0,97 & 0,11 \\ -0,24 & 0,05 & -0,97 \\ -0,94 & -0,25 & 0,22 \end{pmatrix}.$$

В заключение выпишем окончательный результат $A = QR$ в явном виде:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 4 \\ 4 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,24 & 0,97 & 0,11 \\ -0,24 & 0,05 & -0,97 \\ -0,94 & -0,25 & 0,22 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -4,24 & -3,77 & -2,12 \\ 0 & 2,19 & 0,91 \\ 0 & 0 & -3,56 \end{pmatrix}.$$

Пример 1.10.

С помощью QR - алгоритма вычислить собственные значения матрицы A из предыдущего примера с точностью $\varepsilon = 0,01$.

Решение.

1. Положим $A^{(0)} = A$ и найдем QR - разложение этой матрицы $A^{(0)} = Q^{(0)} R^{(0)}$. Эта процедура подробно рассмотрена в предыдущем примере. Получены следующие $Q^{(0)}, R^{(0)}$:

$$Q^{(0)} = \begin{pmatrix} -0,24 & 0,97 & 0,11 \\ -0,24 & 0,05 & -0,97 \\ -0,94 & -0,25 & 0,22 \end{pmatrix}, \quad R^{(0)} = \begin{pmatrix} -4,24 & -3,77 & -2,12 \\ 0 & 2,19 & 0,91 \\ 0 & 0 & -3,56 \end{pmatrix}.$$

Матрицу $A^{(1)}$ определим перемножением полученных в результате QR - разложения матриц в обратном порядке $A^{(1)} = R^{(0)} Q^{(0)}$:

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 3,89 & -3,75 & 2,74 \\ -1,38 & -0,12 & -1,92 \\ 3,35 & 0,9 & -0,77 \end{pmatrix}.$$

Первая итерация завершена. Поддиагональные элементы матрицы $A^{(1)}$ достаточно велики, поэтому итерационный процесс необходимо продолжить.

2. а). Находим QR - разложение $A^{(1)} = Q^{(1)} R^{(1)}$ (используя преобразование Хаусхолдера аналогично примеру):

$$Q^{(1)} = \begin{pmatrix} -0,73 & 0,68 & 0,05 \\ 0,26 & 0,21 & 0,94 \\ -0,63 & -0,7 & 0,33 \end{pmatrix}, \quad R^{(1)} = \begin{pmatrix} -5,32 & 2,14 & -2,02 \\ 0 & 3,21 & -2,0 \\ 0 & 0 & -1,93 \end{pmatrix}.$$

б). Перемножая полученные выше матрицы в обратном порядке находим матрицу $A^{(2)}$:

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} 5,72 & 1,75 & 1,09 \\ 2,09 & -2,08 & 2,37 \\ 1,22 & -1,36 & -0,64 \end{pmatrix}.$$

Продолжая итерационный процесс получим соответственно на 6-ой и 7-ой итерациях следующие матрицы:

$$A^{(6)} = \begin{pmatrix} 6,34 & 0,94 & -0,73 \\ 0,034 & -2,53 & 1,69 \\ 0,023 & -1,86 & -0,81 \end{pmatrix}, \quad A^{(7)} = \begin{pmatrix} 6,34 & 0,27 & 1,13 \\ -0,0014 & -2,01 & -2,58 \\ 0,0006 & 0,98 & -1,33 \end{pmatrix}.$$

Видно, что поддиагональные элементы первого столбца становятся достаточно малыми, и, следовательно, диагональный элемент $a_{11}^{(7)}$ может быть принят в качестве собственного значения. В то же время отчетливо прослеживается комплексно-сопряженная пара собственных значений, соответствующая блоку, образуемому элементами второго и третьего столбцов $a_{22}^{(k)}, a_{23}^{(k)}, a_{32}^{(k)}, a_{33}^{(k)}$. Несмотря

на значительное изменение в ходе итераций самих этих элементов, собственные значения, соответствующие данному блоку и определяемые из решения квадратного уравнения $(a_{22}^{(k)} - \lambda^{(k)})(a_{33}^{(k)} - \lambda^{(k)}) = a_{23}^{(k)} a_{32}^{(k)}$, меняются незначительно (в пределах допустимой погрешности). Таким образом, окончательное решение задачи можно записать в виде: $\lambda_1 = \lambda_1^{(7)} = 6,34$, $\lambda_2 = \lambda_2^{(7)} = -1,67 + 1,55i$, $\lambda_3 = \lambda_3^{(7)} = -1,67 - 1,55i$.

Найдите больше информации на сайте **Учитель.ру** (www.uchites.ru)!