

5. Алгебраїчна проблема власних значень

Нехай задано матрицю $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Тоді задача на власні значення ставиться так: знайти число λ та вектор $x \neq 0$, що задовольняють рівнянню

$$Ax = \lambda x. \quad (1)$$

Означення: λ називається *власним значенням* A , а x — *власним вектором*.

З (1)

$$\det(A - \lambda E) = P_n(\lambda) = (-1)^n \lambda^n + a_n \lambda^{n-1} + \dots + a_0 = 0. \quad (2)$$

Тут $P_n(\lambda)$ — характеристичний багаточлен.

Для розв'язання багатьох задач механіки, фізики, хімії потрібне знаходження всіх власних значень $\lambda_i, i = \overline{1, n}$, а іноді й всіх власних векторів x_i , що відповідають λ_i .

Означення: Цю задачу називають *повною проблемою власних значень*.

В багатьох випадках потрібно знайти лише максимальне або мінімальне за модулем власне значення матриці. При дослідженні стійкості коливальних процесів іноді потрібно знайти два максимальних за модулем власних значення матриці.

Означення: Останні дві задачі називають *частковими проблемами власних значень*.

5.1. Степеневий метод

1. Знаходження λ_{\max} : $\lambda_{\max} \equiv |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots$

Нехай $x^{(0)}$ — заданий вектор, будемо послідовно обчислювати вектори

$$x^{(k+1)} = Ax^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (3)$$

Тоді $x^{(k)} = A^k x^{(0)}$. Нехай $\{e_i\}_{i=1}^n$ — система власних векторів. Представимо $x^{(0)}$ у вигляді:

$$x^{(0)} = \sum_{i=1}^n c_i e_i. \quad (4)$$

Оскільки $Ae_i = \lambda_i e_i$, то $x^{(k)} = \sum_{i=1}^n c_i \lambda_i^k e_i$. При великих k : $x^{(k)} \approx c_1 \lambda_1^k e_1$. Тому

$$\mu_1^{(k)} = \frac{x_m^{(k+1)}}{x_m^{(k)}} = \lambda_1 + O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right). \quad (5)$$

Значить $\mu_1^{(k)} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \lambda_1$.

Якщо матриця $A = A^T$ симетрична, то існує ортонормована система векторів $\langle e_i, e_j \rangle = \delta_{ij}$. Тому

$$\begin{aligned} \mu_1^{(k)} &= \frac{\langle x^{(k+1)}, x^{(k)} \rangle}{\langle x^{(k)}, x^{(k)} \rangle} = \frac{\left\langle \sum_i c_i \lambda_i^{k+1} e_i, \sum_j c_j \lambda_j^k e_j \right\rangle}{\left\langle \sum_i c_i \lambda_i^k e_i, \sum_j c_j \lambda_j^k e_j \right\rangle} = \frac{\sum_i c_i^2 \lambda_i^{2k+1}}{\sum_i c_i^2 \lambda_i^{2k}} = \\ &= \frac{c_1^2 \lambda_1^{2k+1} + c_2^2 \lambda_2^{2k+1} + \dots}{c_1^2 \lambda_1^{2k} + c_2^2 \lambda_2^{2k} + \dots} = \lambda_1 + O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^{2k}\right) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \lambda_1. \end{aligned} \quad (6)$$

Це означає збіжність до максимального за модулем власного значення з квадратичною швидкістю.

Якщо $|\lambda_1| > 1$, то при проведенні ітерацій відбувається зріст компонент вектора $x^{(k)}$, що приводить до «переповнення» (overflow). Якщо ж $|\lambda_1| < 1$, то це приводить до зменшення компонент (underflow). Позбутися негативу такого явища можна нормуючи вектори $x^{(k)}$ на кожній ітерації.

Алгоритм степеневому методу знаходження максимального за модулем власного значення з точністю ε виглядає так:

```
e[0] = x[0] / norm(x[0])

k = 0
while True:
    k += 1

    x[k + 1] = A * x[k]
    μ[k][1] = scalar_product(x[k + 1], e[k])
    e[k + 1] = x[k + 1] / norm(x[k + 1])

    if abs(μ[k + 1][1] - μ[k][1]) < ε:
        break

λ[1] = μ[k + 1][1]
```

За цим алгоритмом для симетричної матриці $A^T = A$ швидкість прямування $\mu_1^{(k)}$ до λ_{\max} — квадратична.

2. Знаходження λ_2 : $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots$. Нехай λ_1, e_1 відомі.

Задача 10: Довести, що якщо $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots$ то

$$\mu_2^{(k)} = \frac{x_m^{(k+1)} - \lambda_1 x_m^{(k)}}{x_m^{(k)} - \lambda_1 x_m^{(k-1)}} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \lambda_2, \quad (7)$$

де $x^{(k+1)} = Ax^{(k)}$, $x_m^{(k)}$ — m -та компонента $x^{(k)}$.

Задача 11: Побудувати алгоритм обчислення λ_2, e_2 , використовуючи нормування векторів та скалярні добутки для обчислення $\mu_2^{(k)}$.

3. Знаходження мінімального власного числа $\lambda_{\min}(A) = \min_i |\lambda_i(A)|$.

Припустимо, що $\lambda_i(a) > 0$ то відоме λ_{\max} . Розглянемо матрицю $B = \lambda_{\max}E - A$.
Маємо

$$\forall i: \quad \lambda_i(B) = \lambda_{\max} - \lambda_i(A). \quad (8)$$

Тому $\lambda_{\max}(B) = \lambda_{\max}(A) - \lambda_{\min}(A)$. Звідси $\lambda_{\min}(A) = \lambda_{\max}(A) - \lambda_{\max}(B)$.

Якщо $\exists i: \lambda_i(A) < 0$, то будемо матрицю $\bar{A} = \sigma E + A$, $\sigma > 0$: $\bar{A} > 0$ і для неї попередній розгляд дає необхідний результат. Замість λ_{\max} в матриці B можна використовувати $\|A\|$.

Ще один спосіб обчислення мінімального власного значення полягає в використанні обернених ітерацій:

$$Ax^{(k+1)} = x^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots \quad (9)$$

Але цей метод вимагає більшої кількості арифметичних операцій: складність методу на основі формули (3): $Q = O(n^2)$, а на основі (9) — $Q = O(n^3)$, оскільки треба розв'язувати СЛАР, але збігається метод (9) швидше.

5.2. Ітераційний метод обертання

Цей метод розв'язання повної проблеми власних значень для симетричних матриць $A^T = A$. Існує матриця U , що приводить матрицю A до діагонального виду:

$$A = U\Lambda U^T, \quad (10)$$

де Λ — діагональна матриця, по діагоналі якої стоять власні значення λ_i ; U — унітарна матриця, тобто: $U^{-1} = U^T$.

З (1) маємо

$$\Lambda = U^T A U. \quad (11)$$

Нехай $\exists \tilde{U}$ — матриця, така що $\tilde{\Lambda} = \tilde{U}^T A \tilde{U}$ і $\tilde{\Lambda} = (\tilde{\lambda}_{ij})_{i,j=1}^n$, $|\tilde{\lambda}_{ij}| < \delta \ll 1, i \neq j$.

Тоді діагональні елементи мало відрізняються від власних значень

$$|\tilde{\lambda}_{ij} - \lambda_i(A)| < \varepsilon = \varepsilon(\delta). \quad (12)$$

Введемо

$$t(A) = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n a_{ij}^2. \quad (13)$$

З малості величини $t(A)$ випливає, що діагональні елементи малі. По $A = A_0$ за допомогою матриць обертання U_k :

$$U_k = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cos \phi & \cdots & -\sin \phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sin \phi & \cdots & \cos \phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

що повертають систему векторів на кут φ , побудуємо послідовність $\{A_k\}$ таку, що $A_k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} \Lambda$.

Задача 12: Показати, що матриця обертання U_k є унітарною: $U_k^{-1} = U_k^T$.

Послідовно будуюмо:

$$A_{k+1} = U_k^T A_k U_k, \quad (15)$$

Означення: Процес (15) називається *монотонним*, якщо: $t(A_{k+1}) < t(A_k)$.

Задача 13: Довести, що для матриці (15) виконується:

$$a_{i,j}^{(k+1)} = a_{i,j}^{(k)} \cos(2\varphi) + \frac{1}{2} (a_{j,j}^{(k)} - a_{i,i}^{(k)}) \sin(2\varphi), \quad (16)$$

Показати, що

$$t(A_{k+1}) = t(A_k) - 2\left(a_{i,j}^{(k)}\right)^2 \quad (17)$$

якщо вибрати φ з умови $a_{i,j}^{(k+1)} = 0$.

Звідси

$$\varphi = \varphi_k = \frac{1}{2} \arctan\left(p^{(k)}\right), \quad (18)$$

тобто

$$p^{(k)} = \frac{2a_{i,j}^{(k)}}{a_{i,i}^{(k)} - a_{j,j}^{(k)}}, \quad (19)$$

де

$$\left|a_{i,j}^{(k)}\right| = \max_{\substack{m,l \\ m \neq l}} \left|a_{m,l}^{(k)}\right|. \quad (20)$$

Тоді $t(A_k) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 0$. Чим більше n тим більше ітерацій необхідно для зведення A до Λ .

Якщо матриця несиметрична, то застосовують QR- або QL-методи.