**Трехдиагонализация матрицы методом Ланцоша**

В рассмотренном выше методе итераций в подпространстве использовалась система векторов. Выбор этих векторов осуществлялся, вообще говоря, произвольно. Т.е. этот выбор никак не зависел от свойств исследуемой матрицы  .

Отметим, что эта процедура использует матрицу  , которая содержит некоторую, хотя и урезанную, информацию о матрице  . В связи с этим естественной выглядит попытка при выборе исходной системы векторов каким-то образом использовать свойства исследуемой матрицы  . Желательно также, чтобы для такого выбора не нужна была матрица  в явном виде, но достаточно иметь правило (программу), позволяющее определить произведение  для произвольного вектора  . Это ограничение связано с тем, что для очень больших матриц иная форма их определения часто оказывается невозможной.

Наилучшим известным на сегодня выбором такой системы являются вектора следующего вида:

где первый вектор  выбирается произвольно, а все остальные вектора уже несут в себе информацию об исследуемой матрице  .

Система векторов (18.1) порождает векторное пространство размерности  . Напомним, что линейным подпространством, порожденным системой векторов   , называется множество всех векторов  , которые можно представить в виде линейной комбинации:

 . (2)

Кстати, короче такое подпространство часто называется линейной оболочкой векторов  . Линейные оболочки системы векторов вида (1) и называются подпространствами Крылова по имени советского академика, впервые использовавшего их для решения практических задач.

Система векторов  хороша тем, что сами вектора этой системы содержат информацию о матрице  . Однако у нее есть серьезный недостаток – эти вектора неортогональны.

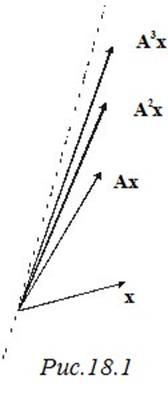


Рисунок 1 – геометрическая иллюстрация метода

Поясним это геометрической иллюстрацией (рис. 1). В результате первого умножения  будет получен вектор, который повернут относительно исходного вектора  на некоторый угол. Вновь умножая полученный вектор на матрицу  , получаем следующий вектор  , который также повернут на некоторый угол по отношению к предыдущему вектору. Из рассмотренного ранее степенного метода нам известно, что вектор  при  стремится к собственному вектору, соответствующему максимальному собственному значению. Таким образом, с ростом  направление очередного вектора все меньше будет отличаться от направления предыдущего. На рис.1 это направление обозначено пунктирной линией.

Нам уже известно средство для «исправления» таких систем векторов – алгоритм Грама ‑ Шмидта. Применив его к системе  можно получить равноценную систему векторов  , но уже с ортогональными единичными векторами. Как мы сейчас увидим, алгоритм Грама ‑ Шмидта, вообще говоря, весьма трудоемкий, значительно упрощается для системы векторов  .

Найдем несколько первых векторов этой ортогональной системы.

Первый вектор 

1) обозначим исходный вектор (зерно подпространства)  ;

2) длину этого вектора обозначим  ;

3) тогда для получения первого вектора  надо только нормировать исходный вектор:

 . (18.2)

Второй вектор 

1) вычисляем очередной вектор Крылова:

 ; (18.3)

2) вычитаем из этого вектора составляющую в направлении  :

 . (18.4)

Здесь введено обозначение:

 . (18.5)

Отметим, что для вычисления  не надо полностью вычислять значение квадратичной формы  , но можно просто вычислить скалярное произведение векторов  и  , определенных на предыдущих шагах;

3) определяем длину вектора  :

 ; (18.6)

4) нормируя вектор  , получаем второй вектор ортогональной системы:

 . (18.7)

Третий вектор 

1) вычисляем очередной вектор Крылова:

 ; (18.8)

2) вычитаем из этого вектора составляющие в направлении  и  :

 . (18.9)

Вновь обозначим

 . (18.10)

Что касается произведения  , то следует отметить, что согласно (18.8)

 . (18.11)

Кроме того, учитывая, что согласно (18.7)

 ,

и в соответствии с (18.3) и (18.4)

 ,

получим

 , (18.12)

т.е. специально вычислять это произведение не надо. Оно уже вычислено на предыдущем шаге.

Итак, окончательно для  получаем

 ; (18.13)

3) вычисляем длину вектора 

 , (18.14)

которая, как нам уже известно, понадобится и на следующем шаге;

4)  . (18.15)

Четвертый вектор  :

1)  ;

2)  .

Здесь необходимо заметить, что  . Вспомним, что при построении  мы представили  как сумму двух составляющих: одна направлена вдоль  , другая вдоль  , т.е.

 ,

где  и  – некоторые коэффициенты. Следовательно,



вследствие взаимной ортогональности векторов  . Следовательно,

 .

Это очень важный момент, определяющий в конечном счете эффективность и популярность метода Ланцоша: для определения вектора  используются вектора  и  , но не нужен вектор  !

Такие же рассуждения можно привести и для произвольного  -го вектора  – для его определения используются  и  и не нужны остальные вектора  ;

3)  ;

4)  .

Теперь мы готовы сформулировать алгоритм построения ортонормированного базиса подпространства Крылова:

|  |
| --- |
| *Задаемся произвольным начальным вектором  длиной  . Если уже определены вектора  , то очередной вектор  определяется следующим образом:* |
| *1.  ;* *2.  ;* *3.  ;* *4.  ;* *5.  .* |

В качестве практической реализации метода приложен файл матлаба.