13. Проблема собственных значений

Требуется найти собственные значения λ матрицы и соответствующие этим собственным значениям собственные векторы x, так что $Ax = \lambda x$.

13.1. Метод вращений (Якоби) для нахождения всех собственных значений и векторов матрицы

Теорема 1. *Если A — эрмитова матрица, то существует такая унитарная матрица V, что преобразование подобия с этой матрицей приводит к диагональному виду, т. е. $V^{-1}AV = \Lambda$, где Λ — диагональная матрица из собственных значений матрицы A.*

Для унитарной матрицы $V^{-1} = V^*$.

Частным случаем унитарной матрицы является ортогональная матрица, для которой выполнено следующее:

$$\sum_{i=1}^{n} V_{ij}^2 = 1,\ \sum_{i=1}^{n} V_{il}V_{ij} = 0,\ j \neq l\,.$$

Обозначим через V^T транспонированную матрицу.

Так как $V^TV = E$, то $V^{-1} = V^T$ и преобразование подобия принимает вид $V^TAV = \Lambda$. Задачу нахождения такой матрицы V решают последовательно.

Пусть A — вещественная симметричная матрица. Для такой матрицы метод вращений заключается в построении последовательности матриц $A^{(0)} = A,\ A^{(1)}, \ldots, A^{(k)}, \ldots,$ так чтобы $A^k \to \Lambda$. Здесь каждая последующая матрица получается из предыдущей при помощи элементарного шага, состоящего в преобразовании подобия предыдущей матрицы посредством некоторой ортогональной матрицы вращения

$$A^{(k+1)} = V^T_{i_kj_k}(\varphi_k)A^{(k)}V_{i_kj_k}(\varphi_k). \tag{1}$$

У матрицы $V_{i_kj_k}(\varphi_k)$ на диагонали стоят единицы всюду, кроме i_k-ой и j_k-ой строк $(i_k < j_k)$ и нули выше и ниже главной диагонали, кроме двух элементов, так что элементы матрицы V описываются следующим образом:

$$\begin{array}{l} v_{ii} = 1,\ i \neq i_k,\ i \neq j_k, \\ v_{i_ki_k} = c,\ v_{j_kj_k} = c,\ c = \cos(\varphi_k), \\ v_{ij} = 0,\ i \neq i_k,\ i \neq j_k,\ j \neq i_k,\ j \neq j_k, \\ v_{i_kj_k} = -s,\ v_{j_ki_k} = s,\ \ s = \sin(\varphi_k). \end{array} \tag{2}$$

При $n = 3$, $i_k = 1$, $j_k = 3$ матрица будет иметь вид

$$V_{13}(\varphi_k) = \begin{pmatrix} \cos\varphi_k & 0 & -\sin\varphi_k \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\varphi_k & 0 & \cos\varphi_k \end{pmatrix}.$$

Матрица $A^{(k+1)}$ строится из $A^{(k)}$ так, чтобы $t^2(A^{(k+1)}) < t^2(A^{(k)})$, где

$$t^2(A^{(k)}) = \sum_{i,j=1,i\neq j}^{n} \left|a_{ij}^{(k)}\right|^2.$$

Можно показать, что при определенном выборе i_k, j_k, φ_k

$$t^2(A^{(k+1)}) \le t^2(A^{(k)}) \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) \tag{3}$$

и следовательно

$$t^2(A^{(k)}) \to 0.$$

Для этого i_k, j_k выбираются как индексы максимального по модулю из наддиагональных элементов матрицы, то есть

$$|a_{i_k j_k}^{(k)}| = \max_{\substack{i,j=1..n \\ i<j}} \left| a_{ij}^{(k)} \right|,$$

а угол φ_k выбирается так, чтобы

$$a_{i_k j_k}^{(k+1)} = \frac{a_{j_k j_k}^{(k)} - a_{i_k i_k}^{(k)}}{2} \sin(2\,\varphi) + a_{i_k j_k}^{(k)} \cos(2\,\varphi) = 0.$$

Отсюда получаем

$$\mathrm{tg}(2\varphi_k) = \frac{2a_{i_k j_k}^{(k)}}{a_{i_k i_k}^{(k)} - a_{j_k j_k}^{(k)}}\ ,\ |\varphi_k| \le \frac{\pi}{4}. \tag{4}$$

Значения $c = \cos(\varphi_k)$ и $s = \sin(\varphi_k)$ можно вычислить и следующим образом:

$$\begin{aligned} &c = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1 + \frac{|a_{i_k i_k} - a_{j_k j_k}|}{d}\right)}, \\ &s = \mathrm{sign}(a_{i_k j_k}(a_{i_k i_k} - a_{j_k j_k}))\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \frac{|a_{i_k i_k} - a_{j_k j_k}|}{d}\right)}, \\ &\text{где } d = \sqrt{(a_{i_k i_k} - a_{j_k j_k})^2 + 4a_{i_k j_k}^2}. \end{aligned} \tag{5}$$

Заметим, что если собственные числа простые $(\lambda_i \ne \lambda_j,\ i \ne j)$ и

$$\left| a_{ij}^{(k)} \right| < \varepsilon,\ i \ne j,$$

то

$$\lambda_i = a_{ii}^{(k)} + O(\varepsilon^2)\ .$$

Собственные числа можно уточнить по следующей формуле:

$$\lambda_i^{(k)} = a_{ii}^{(k)} + \sum_{j \ne i} \frac{(a_{ij}^{(k)})}{a_{ii}^{(k)} - a_{jj}^{(k)}}, \tag{6}$$

тогда

$$\lambda_i = \lambda_i^{(k)} + O(\varepsilon^3).$$

Рассмотрим формулы для элементов матрицы $A^{(k+1)}$.

Обозначим

$$B^{(k)} = A^{(k)} V_{i_k j_k}(\varphi_k),$$

тогда очевидно, что у матрицы $B^{(k)}$ изменятся только i_k и j_k столбцы, а у матрицы $A^{(k+1)} = V_{i_k j_k}^T(\varphi_k) B^{(k)}$ изменятся только i_k и j_k строки, так что в итоге пересчитываем элементы только двух строк или двух столбцов[1] матрицы по формулам:

$$\begin{aligned} &a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} \quad i \ne i_k, i \ne j_k, j \ne i_k, j \ne j_k. \\ &a_{i i_k}^{(k+1)} = a_{i_k i}^{(k+1)} = c a_{i i_k}^{(k)} + s a_{i j_k}^{(k)}, \\ &a_{i j_k}^{(k+1)} = a_{j_k i}^{(k+1)} = -s a_{i i_k}^{(k)} + c a_{i j_k}^{(k)},\ i \ne i_k, i \ne j_k. \\ &a_{i_k i_k}^{(k+1)} = c^2 a_{i_k i_k}^{(k)} + 2cs a_{i_k j_k}^{(k)} + s^2 a_{j_k j_k}^{(k)}, \\ &a_{j_k j_k}^{(k+1)} = s^2 a_{i_k i_k}^{(k)} - 2cs a_{i_k j_k}^{(k)} + c^2 a_{j_k j_k}^{(k)}, \\ &a_{i_k j_k}^{(k+1)} = a_{j_k i_k}^{(k+1)} = (c^2 - s^2) a_{i_k j_k}^{(k)} + cs(a_{j_k j_k}^{(k)} - a_{i_k i_k}^{(k)}) = 0. \end{aligned} \tag{7}$$

[1] По этой причине нерационально строить матрицу $A^{(k+1)}$ по формуле (1), используя матричные умножения.

Очевидно, что собственные векторы будут столбцами матрицы

$$X = V_{i_0 j_0} V_{i_1 j_1} \dots V_{i_k j_k}. \tag{8}$$

Итак, для решения задачи следует выполнить следующие действия:

1. Подготовить единичную матрицу для собственных векторов ($X = E$).
2. В матрице $A^{(k)}$ ($k = 0, 1, \dots$) выбрать среди всех наддиагональных элементов максимальный по абсолютной величине элемент $a^{(k)}_{i_k j_k}$, $i_k < j_k$ и запомнить его индексы.
3. Проверить условие $\left| a^{(k)}_{i_k j_k} \right| < \varepsilon$.
   Если условие не выполнено — перейти к п. 4, если выполнено, завершить процесс.
4. Найти $c = \cos(\varphi_k)$, $s = \sin(\varphi_k)$.
5. Пересчитать элементы матрицы $A^{(k+1)}$ по формулам (7), пересчитать элементы матрицы X.
6. Перейти к п.2.

13.2. Степенной метод и метод скалярных произведений для нахождения максимального по модулю собственного числа симметричной матрицы

Предположим, что собственные числа матрицы пронумерованы следующим образом:

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

Пусть наибольшее по модулю собственное значение матрицы λ_1 вещественное и простое.

Для нахождения λ_1 выберем $Y^{(0)}$ — начальный вектор. $Y^{(0)}$ следует выбирать так, чтобы коэффициент α_1 в разложении $Y^{(0)} = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots \alpha_n x_n$ не был бы слишком мал. Здесь $x_1, x_2, \dots, x_n$ — собственные векторы, так что $Ax_i = \lambda_i x_i$, $i = 1, 2, \dots, n$.
$Y^{(0)}$ выбирается опытным путем.

Далее строится последовательность векторов $Y^{(1)}, Y^{(2)}, \dots$ по формуле $Y^{(k+1)} = AY^{(k)}$.

$$Y^{(k)} = (y_1^{(k)}, y_2^{(k)}, \dots, y_n^{(k)})'.$$

13.2.1. Степенной метод

Обозначим

$$(\lambda_1^{(k,i)})_{pow} = \frac{y_i^{(k+1)}}{y_i^{(k)}}, \tag{9}$$

тогда

$$\lambda_1 = \lim_{k \to \infty} (\lambda_1^{(k,i)})_{pow}, \;\; i = 1, 2, \dots, n, \;\; \lambda_1 = (\lambda_1^{(k,i)})_{pow} + O\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k.$$

Хорошее совпадение требуемого числа знаков в отношении

$$\frac{y_i^{(k+1)}}{y_i^{(k)}}$$

для нескольких компонент может служить признаком для прекращения итераций.

Вектор $Y^{(k)}$ можно взять в качестве приближения к собственному вектору.

13.2.2. Метод скалярных произведений

Расчетные формулы метода выпишем в предположении, что матрица симметричная.

Обозначим

$$(\lambda_1^{(k)})_{scal} = \frac{(Y^{(k+1)}, Y^{(k)})}{(Y^{(k)}, Y^{(k)})}, \tag{10}$$

тогда

$$\lambda_1 = \lim_{k\to\infty} (\lambda_1^{(k)})_{scal}, \ \ \lambda_1 = (\lambda_1^{(k)})_{scal} + O\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k}.$$

Хорошее совпадение требуемого числа знаков $(\lambda_1^{(k)})_{scal}$, $(\lambda_1^{(k+1)})_{scal}$ может служить признаком для прекращения итераций.

Вектор $Y^{(k)}$ можно взять в качестве приближения к собственному вектору.

Замечание 1. При $|\lambda_1|>1$ компоненты вектора $Y^{(k)}$ быстро растут с возрастанием k, а при $|\lambda_1|<1$ быстро убывают. Чтобы устранить это нежелательное при вычислениях явление, векторы $Y^{(k)}$ нормируют, например, следующим образом. Пусть

$$\left|y_p^{(0)}\right| = \max_{1\le i\le n} \left|y_i^{(0)}\right|,$$

Тогда нормируем вектор $Y^{(k)}$ следующим образом:

$$Y_{norm}^{(k)} = \frac{Y^{(k)}}{y_p^{(k)}},$$

так что

$$(y_{norm}^{(k)})_p = 1.$$

В этом случае расчетная формула в степенном методе примет вид:

$$(\lambda_1^{(k,p)})_{pow} = y_p^{(k+1)} \tag{11}$$

и для достижения требуемой точности можно следить за совпадением требуемого числа знаков у соседних приближений к собственному числу $y_p^{(k)}$ и $y_p^{(k+1)}$.

Аналогично в методе скалярных произведений расчетная формула примет вид:

$$(\lambda_1^{(k)})_{scal} = \frac{(AY_{norm}^{(k)}, Y_{norm}^{(k)})}{(Y_{norm}^{(k)}, Y_{norm}^{(k)})}. \tag{12}$$

Замечание 2. Как ранее указывалось, сходимость методов зависит от выбора начального вектора $Y^{(0)}$ и отношения λ_2/λ_1.

13.3. Нахождение противоположной границы спектра

Обозначим искомое собственное число $\bar\lambda(A)$.

Пусть $\lambda_1(A)$ найдено.

Построим матрицу $B = A - \lambda_1(A)E$, так что $\lambda(B) = \lambda(A) - \lambda_1(A)$.

Рассмотрим 2 случая.

а) $\lambda_1(A) > 0$, значит $\lambda_1(A) = \max\limits_{1\le i\le n} \lambda_i(A)$ и требуется найти

$$\bar\lambda(A) = \min_{1\le i\le n} \lambda_i(A).$$

В этом случае $\lambda(B) \le 0$ и, следовательно, применяя степенной метод или метод скалярных произведений, можно вычислить

$$\bar\lambda(B) = \min_{1\le i\le n} \lambda_i(B)$$

и далее искомое

$$\bar\lambda(A) = \bar\lambda(B) + \lambda_1(A).$$

б) $\lambda_1(A) < 0$, значит $\lambda_1(A) = \min \lambda(A)$ и требуется найти

$$\bar{\lambda}(A) = \max_{1 \le i \le n} \lambda_i(A).$$

В этом случае $\lambda(B) \ge 0$ и, следовательно, применяя степенной метод или метод скалярных произведений, можно вычислить

$$\bar{\lambda}(B) = \max_{1 \le i \le n} \lambda_i(B)$$

и далее искомое

$$\bar{\lambda}(A) = \bar{\lambda}(B) + \lambda_1(A).$$

Замечание. Если известно, что λ_1(A)>0 и в задаче речь сразу идет о нахождении минимального собственного числа, то матрицу B строят следующим образом: $B = A - ||A||E$.

13.4. Метод Виландта для уточнения изолированного собственного числа (метод обратных итераций)

Пусть известно $\lambda^{(0)}(A)$ — приближение к искомому собственному числу матрицы A. Тогда "сдвинутая" матрица $W = A - \lambda^{(0)}(A)E$ будет иметь одно собственное число значительно меньшее по модулю, чем остальные и итерации матрицей $W^{-1} = (A - \lambda^{(0)}E)^{-1}$ дадут быстро сходящийся процесс. Применяя степенной метод или метод скалярных произведений, находим с заданной точностью собственное число $\lambda(W^{-1})$ и учитывая что

$\lambda(W^{-1}) = 1/(\lambda(A) - \lambda^{(0)}(A))$, находим $\lambda(A) = 1/\lambda(W^{-1}) + \lambda^{(0)}(A)$.

Замечание 1. Процесс будет сходиться тем быстрее, чем точнее подобрано $\lambda^{(0)}(A)$.

Замечание 2. При построении последовательности векторов $Y^{(1)}, Y^{(2)}, \ldots, Y^{(k)}$ вместо $Y^{(k+1)} = W^{-1}Y^{(k)}$ экономичнее решать систему $WY^{(k+1)} = Y^{(k)}$.

Замечание 3. Для ускорения процесса рекомендуется применять метод Виландта с параметром, то есть с матрицей W^{-1} предполагается выполнять лишь одну итерацию и полученное приближение к собственному числу использовать сразу для уточнения приближения к собственному числу матрицы , т. е. на каждом шаге выполнять следующие действия:

1. Построить матрицу W по формуле $W = A - \lambda^{(k)}E$ (начинать с $k = 0$).
2. Найти $Y^{(k+1)}$ из системы $WY^{(k+1)} = Y^{(k)}$.
3. Вычислить, например, степенным методом приближение μ к собственному числу матрицы W^{-1}.
4. Найти $\lambda^{(k+1)}(A) = 1/\mu + \lambda^{(k)}(A)$ и далее повторять, начиная с пункта 1.

   Итерации следует выполнять до совпадения требуемого количества знаков $\lambda^{(k)}(A)$ и $\lambda^{(k+1)}(A)$.

Варианты заданий Варианты матриц