Алгоритм Якоби и QR итерации

Андрей Штундер

Метод Якоби

Метод Якоби — итерационный алгоритм для вычисления собственных значений и собственных векторов вещественной симметричной матрицы.

Алгоритм

Исходные данные: симметричная матрица A (элементы a_{ij}).

Вычисляемые данные: диагональная матрица Λ (элементы λ_{ij}).

Матрица A_{i+1} получается из A_i по формуле $A_{i+1} = J_i^T A_i J_i$, где J_i — ортогональная матрица, называемая вращением Якоби. При подходящем выборе J_i матрица A_m для больших m будет близка к диагональной матрице Λ.

Матрица J_i выбирается так, чтобы сделать нулями пару внедиагональных элементов матрицы A_{i+1}.

$$
J_i = \begin{array}{cc}
 & \begin{array}{ccccccccc} & & & j & & k & & & \end{array} \\
\begin{array}{c} \\ \\ \\ j \\ \\ k \\ \\ \\ \\ \end{array} &
\begin{bmatrix}
1 & & & & & & & & \\
 & 1 & & & & & & & \\
 & & \ddots & & & & & & \\
 & & & \cos(\theta) & & -\sin(\theta) & & & \\
 & & & & \ddots & & & & \\
 & & & \sin(\theta) & & \cos(\theta) & & & \\
 & & & & & & \ddots & & \\
 & & & & & & & 1 & \\
 & & & & & & & & 1
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

Обозначим $s = \sin(\theta)$ и $c = \cos(\theta)$. Тогда матрица A_{i+1} состоит из следующих элементов:

$$
\begin{aligned}
a_{jj}^{(i+1)} &= c^2\, a_{jj}^{(i)} - 2sc\, a_{jk}^{(i)} + s^2\, a_{kk}^{(i)} \\
a_{kk}^{(i+1)} &= s^2\, a_{jj}^{(i)} + 2sc\, a_{jk}^{(i)} + c^2\, a_{kk}^{(i)} \\
a_{jk}^{(i+1)} &= a_{kj}^{(i+1)} = (c^2 - s^2)\, a_{jk}^{(i)} + sc\,(a_{kk}^{(i)} - a_{jj}^{(i)}) \\
a_{jm}^{(i+1)} &= a_{mj}^{(i+1)} = c\, a_{jm}^{(i)} - s\, a_{km}^{(i)} && m \neq j,k \\
a_{km}^{(i+1)} &= a_{mk}^{(i+1)} = s\, a_{jm}^{(i)} + c\, a_{km}^{(i)} && m \neq j,k \\
a_{ml}^{(i+1)} &= a_{ml}^{(i)} && m,l \neq j,k
\end{aligned}
$$

Можно выбрать θ так, чтобы $a_{jk}^{(i+1)} = 0$ и $a_{kj}^{(i+1)} = 0$. Отсюда получим равенство

$$\frac{a_{jj}^{(i)} - a_{kk}^{(i)}}{2a_{jk}^{(i)}} = \frac{c^2 - s^2}{2sc} = \frac{\cos(2\theta)}{\sin(2\theta)} = \mathrm{ctg}(2\theta) \equiv \tau.$$

Если $a_{jj}^{(i)} = a_{kk}^{(i)}$, то $\theta = \frac{\pi}{4}$.

Положим $t = \frac{s}{c} = \mathrm{tg}(\theta)$ и заметим, что $t^2 + 2t\tau - 1 = 0$. Решая квадратное уравнение, находим

$$t = \frac{\mathrm{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1+\tau^2}}, \quad c = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}, \quad s = tc.$$

Выбор параметров j и k производится путем построчного циклического обхода внедиагональных элементов матрицы A.

QR-алгоритм

QR-алгоритм — это численный метод в линейной алгебре, предназначенный для отыскания всех собственных чисел и собственных векторов матрицы.

Алгоритм

Исходные данные: симметричная матрица A (элементы a_{ij}).

Вычисляемые данные: диагональная матрица Λ (элементы λ_{ij}).

Пусть A — вещественная матрица, для которой мы хотим найти собственные числа и векторы.

Положим $A_0 = A$.

На k-м шаге (начиная с $k = 0$) вычислим QR-разложение $A_k = Q_k R_k$, где Q_k — ортогональная матрица (то есть $Q_k^T = Q_k^{-1}$), а R_k — верхняя треугольная матрица. Затем мы определяем $A_{k+1} = R_k Q_k$.

Заметим, что

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k,$$

то есть все матрицы A_{k+1} являются подобными, и подобными матрице A, то есть их собственные значения равны.

Пусть все диагональные миноры матрицы A не вырождены. Тогда последовательность матриц A_k при $k \to \infty$, сходится по форме к клеточному правому треугольному виду, соответствующему клеткам с одинаковыми по модулю собственными значениями.

Для того, чтобы получить собственные векторы матрицы, нужно перемножить все матрицы Q_k.

Будем считать, что собственные числа положительно-определённой матрицы A упорядочены по убыванию:

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \ldots > \lambda_n > 0.$$

Пусть

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

а S — матрица, составленная из собственных векторов матрицы A. Тогда, матрица A может быть записана в виде спектрального разложения

$$A = S\Lambda S^T.$$

Найдём выражение для степеней исходной матрицы через матрицы Q_k и R_k. С одной стороны, по определению QR-алгоритма:

$$A^k = A_1^k = (Q_1 R_1)^k = Q_1 (R_1 Q_1)^{k-1} R_1 = Q_1 A_2^{k-1} R_1.$$

Применяя это соотношение рекурсивно, получим:

$$A^k = Q_1 \cdot \ldots \cdot Q_k \cdot R_k \cdot \ldots \cdot R_1$$

Введя следующие обозначения:

$$S_k = Q_1 \cdot \ldots \cdot Q_k,$$

$$T_k = R_k \cdot \ldots \cdot R_1,$$

получим

$$A^k = S_k T_k.$$

С другой стороны:

$$A^k = S\Lambda^k S^T.$$

Приравнивая правые части последних двух формул, получим:

$$S\Lambda^k S^T = S_k T_k.$$

Предположим, что существует LU-разложение матрицы S^T:

$$S^T = LU,$$

тогда

$$S\Lambda^k LU = S_k T_k.$$

Умножим справа на обратную к U матрицу, а затем — на обратную к Λ_k:

$$S\Lambda^k L = S_k T_k U^{-1},$$

$$S\Lambda^k L\Lambda^{-k} = S_k T_k U^{-1}\Lambda^{-k}.$$

Рассматривая матрицу $\Lambda^k L\Lambda^{-k}$, заметим, что

$$(\Lambda^k L\Lambda^{-k})_{ij} = \begin{cases} \ell_{ij} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^k, & i > j, \\ 1 & i = j, \\ 0, \text{иначе} \end{cases}$$

поэтому матрица $\Lambda^k L \Lambda^{-k} \to I$ при $k \to \infty$, где I — единичная матрица.

Тогда

$$S_k T_k U^{-1} \Lambda^{-k} \to S.$$

Обозначим

$$P_k = T_k U^{-1} \Lambda^{-k},$$

причём матрица P_k является верхнетреугольной, как произведение верхнетреугольных и диагональных матриц.

Таким образом, мы доказали, что

$$S_k P_k \to S.$$

Из единственности QR-разложения следует, что если произведение ортогональной и треугольной матрицы сходится к ортогональной матрице, то треугольная матрица сходится к единичной матрице. Из сказанного следует, что

$$S_k = Q_1 \cdot \ldots \cdot Q_k \to S.$$

То есть матрицы S_k сходятся к матрице собственных векторов матрицы А.

Так как

$$A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k = \ldots = \left(Q_k^T \cdot \ldots \cdot Q_1^T\right) A_1 \left(Q_1 \cdot \ldots \cdot Q_k\right) = (Q_1 \cdot \ldots \cdot Q_k)^T A (Q_1 \cdot \ldots \cdot Q_k),$$

то

$$A_{k+1} = S_k^T A S_k.$$

Переходя к пределу, получим:

$$\lim_{k\to\infty} A_k = \lim_{k\to\infty} A_{k+1} = S^T A S = S^T S \Lambda S^T S = \Lambda.$$

Итак, мы доказали, что QR-алгоритм позволяет вычислить собственные значения и собсвенные вектора для симметричной положительно-определённой матрицы.