ЛЕКЦИЯ 11.2 НАХОЖДЕНИЕ НАИМЕНЬШЕГО СОБСТВЕННОГО ЧИСЛА. МЕТОД ВРАЩЕНИЙ ЯКОБИ РЕШЕНИЯ СИММЕТРИЧНОЙ ПОЛНОЙ ПРОБЛЕМЫ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

1. Нахождение наименьшего по модулю собственного числа матрицы

Используя свойства собственных чисел, после вычисления наибольшего по модулю собственного числа можно вычислить и наименьшее. Пусть матрица A знакоопределённая, λ_1 – её максимальное по модулю собственное число, λ_n – минимальное. Напомним, что матрица A называется *знакоопределённой*, если для всех ненулевых векторов $\bar{x}$ скалярное произведение $(A\bar{x}, \bar{x})$ сохраняет знак. Если оно положительно, то матрица A знакоположительна (или просто положительна), если отрицательно – то матрица знакоотрицательна; если неотрицательно, то A неотрицательно определена, а если неположительна, то A неположительно определена. Если $(\lambda_i;\ \bar{x}_i)$ – собственная пара матрицы A, то

$$\begin{cases} A\bar{x}_i = \lambda_i \bar{x}_i, \\ \lambda_1 E\bar{x}_i = \lambda_1 \bar{x}_i. \end{cases}$$

Вычтя второе равенство из первого, получаем

$$(A - \lambda_1 E)\bar{x}_i = (\lambda_i - \lambda_1)\bar{x}_i. \qquad (1)$$

Соотношение (1) означает, что $\lambda_i - \lambda_1$ – собственное число матрицы $A - \lambda_1 E$. Известно, что все собственные числа знакоопределённой матрицы вещественны и имеют одинаковый знак. Поэтому величина $|\lambda_n - \lambda_1|$ является наибольшей среди всех разностей $|\lambda_i - \lambda_1|$, $i = 2, \dots, n-1$. Следовательно, $\lambda_n - \lambda_1$ - наибольшее по модулю собственное число матрицы $A - \lambda_1 E$. Пусть $\mu = \lambda_n - \lambda_1$. Тогда наименьшее по модулю собственное число матрицы A будет равно

$$\lambda_n = \mu + \lambda_1,$$

Итак, надо вычислить степенным методом наибольшее по модулю собственное число μ матрицы $A - \lambda_1 E$. Тогда $\mu + \lambda_1$ – наименьшее по модулю собственное число матрицы A.

Также наименьшее по модулю собственное число методом обратной матрицы. Пусть матрица A невырожденная, λ – его собственное число. По свойству 5 собственных значений и векторов (лекция 11.1) $\frac{1}{\lambda}$ является собственным числом матрицы A^{-1}, а её собственный вектор тот же, что у матрицы A. Итак, если вычислено наибольшее по модулю собственное число β_1 матрицы A^{-1}, то число $\frac{1}{\beta_1}$ является наименьшим собственным числом матрицы A.

Пример. Для матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

методом обратной матрицы вычислим наименьшее по модулю собственное число.

Наибольшее по модулю собственное число матрицы A^{-1} вычислим степенным методом. Расчётные формулы в этом случае следующие:

$$\begin{cases} \bar{x}^{(k)} = A^{-1}\bar{x}^{(k-1)}, \\ \beta_1^{(k)} = \dfrac{\left(\bar{x}^{(k)}, \bar{x}^{(k-1)}\right)}{\left(\bar{x}^{(k-1)}, \bar{x}^{(k-1)}\right)}, \end{cases}$$

$k = 1, 2, \ldots$. Итерации $\beta_1^{(k)}$ вычисляем до совпадения трёх знаков после запятой, получим $\beta_1^{(4)} = -1{,}425$. Тогда наименьшее по модулю собственное число матрицы A равно

$$|\lambda_3| = \frac{1}{1{,}425} = 0{,}702.$$

2. Метод вращений Якоби решения симметричной полной проблемы собственных значений

2.1. Матрица плоских вращений

Теперь изучим один из итерационных методов решения полной проблемы собственных значений для вещественной симметрической матрицы – метод вращений Якоби. Основная операция метода – это вращение векторного пространства. Матрица плоских вращений T^{ij} получается из единичной заменой двух единиц и двух нулей на пересечениях *i*-х и *j*-х строк и столбцов числами c, s и $-s$. Единицы на главной диагонали (в *i*-й и *j*-й строках) заменяются числом c, нули вне диагонали (индексы i, j и j, i) заменяются на s и $-s$. При этом $c^2 + s^2 = 1$, поэтому числа c и s можно интерпретировать как синус и косинус некоторого угла α. Итак, матрица T^{ij} состоит из следующих элементов:

$$\left(T^{ij}\right)_{ii} = \left(T^{ij}\right)_{jj} = c, \left(T^{ij}\right)_{ij} = s, \left(T^{ij}\right)_{ji} = -s,$$

где $c^2 + s^2 = 1$, $i > j$. Остальные элементы совпадают с соответствующими у единичной матрицы:

$$T^{ij} = \begin{pmatrix} 1 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ \cdots & c & \cdots & -s & \cdots \\ \cdots & \vdots & \vdots\vdots & \cdots & \\ \cdots & s & \cdots & c & \cdots \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Матрица T^{ij} ортогональна при любых i, j:

$$T^{ij} {T^{ij}}^T = E,$$

а значит, не вырождена. Этот равенство можно проверить, перемножив матрицы T^{ij} и ${T^{ij}}^T$.

Пусть A - вещественная симметрическая матрица, для которой надо решить полную проблему собственных значений. Матрица

$$B = {T^{ij}}^T A\, T^{ij}$$

подобна матрице A и, следовательно, имеет тот же набор собственных чисел. Кроме того, она симметрична. Действительно,

$$B^T = \left({T^{ij}}^T A\, T^{ij}\right)^T = {T^{ij}}^T A^T\, T^{ij} = {T^{ij}}^T A\, T^{ij} = B.$$

2.2. Алгоритм метода вращений

Метод вращений предполагает построение последовательности матриц $\{B_k\}_{k=0}^{\infty}$, $B_0 = A$, с помощью преобразований подобия вращением векторного пространства. При этом обнуляется максимальный по модулю элемент; но полученные на некотором шаге нулевые элементы на другом шаге могут стать ненулевыми. Фактически строится последовательность матриц

$$B_0 = A,$$
$$B_1 = T_0^T B_0 T_0,$$
$$B_2 = T_1^T B_1 T_1,$$
$$\vdots$$
$$B_{k+1} = T_k^T B_k T_k,$$
$$\vdots$$

В этой последовательности матрицы T_k – матрицы вращений T^{ij}, в которых i, j – индексы максимального по модулю недиагонального элемента B_k. Каждая следующая матрица подобна предыдущей, значит, имеет те же собственные числа. Все матрицы симметричны (это было доказано выше). Нужно эту последовательность привести к диагональной матрице.

Даже если за конечное число шагов нельзя прийти к диагональной матрице, всё равно её можно получить в пределе: если

$$\lim_{k\to\infty} B_k = \Lambda,$$

где Λ – диагональная матрица, то задача решается предложенным методом. При достижении заданной точности очередную итерационную матрицу B_k считают диагональной с собственными числами матрицы A на диагонали. Надо вывести расчётную формулу (т.е. алгоритм расчёта матрицы вращений на очередном шаге) и оценку погрешности для останова итерационного процесса.

Пусть A - исходная симметричная матрица, B - матрица, получающаяся после одного итерационного шага; $\tilde{A}, \tilde{B}$ - двумерные подматрицы этих матриц для фиксированных i, j:

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ a_{ij} & a_{jj} \end{pmatrix}, \tilde{B} = \begin{pmatrix} b_{ii} & b_{ij} \\ b_{ij} & b_{jj} \end{pmatrix}, \tilde{T} = \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix},$$

$\tilde{T}$ – подматрица матрицы вращений T^{ij} этого шага. Формула $B = T^T A T$, по которой вычисляется очередная итерация, верна и для подматриц $\tilde{A}$, $\tilde{B}$:

$$\tilde{B} = \tilde{T}^T \tilde{A}\, \tilde{T}.$$

Вычислим $\tilde{B}$:

$$\tilde{B} = \tilde{T}^T \tilde{A}\, \tilde{T} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ a_{ij} & a_{jj} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} c^2 a_{ii} + 2cs a_{ij} + s^2 a_{jj} & c^2 a_{ij} - cs a_{ii} + cs a_{jj} - s^2 a_{ij} \\ c^2 a_{ij} - cs a_{ii} + cs a_{jj} - s^2 a_{ij} & c^2 a_{jj} - 2cs a_{ij} + s^2 a_{ii} \end{pmatrix}.$$

Получаем симметричную матрицу. Далее приравниваем к нулю недиагональные элементы:

$$(c^2 - s^2) a_{ij} - cs\left(a_{ii} - a_{jj}\right) = 0.$$

Из последнего равенства получаем выражение, связывающее c и s:

$$\frac{cs}{c^2 - s^2} = \frac{a_{ij}}{a_{ii} - a_{jj}}\,. \tag{2}$$

Теперь вспомним о тригонометрической интерпретации c и s (см. п. 2.1):

$$\begin{cases} c = \cos\alpha\,, \\ s = \sin\alpha\,. \end{cases} \tag{3}$$

Подставляем $\cos\alpha$ и $\sin\alpha$ в (2):

$$\frac{cs}{c^2 - s^2} = \frac{\cos\alpha\sin\alpha}{\cos^2\alpha - \sin^2\alpha} = \frac{a_{ij}}{a_{ii} - a_{jj}} \Rightarrow \frac{2\cos\alpha\sin\alpha}{\cos^2\alpha - \sin^2\alpha} = \frac{2a_{ij}}{a_{ii} - a_{jj}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \ \mathrm{tg}2\alpha = \frac{2a_{ij}}{a_{ii} - a_{jj}},$$

где

$$\alpha \in \left(-\frac{\pi}{4}; \frac{\pi}{4}\right].$$

Получаем уравнение, из которого можно определить угол α в указанном полуинтервале.

Итак, итерационный шаг метода вращений описывается следующим образом. Пусть на *k*-м шаге вычислена матрица B_k. Находим её максимальный недиагональный элемент b_k^{ij}. Решаем уравнение

$$\mathrm{tg}2\alpha = \frac{2b_k^{ij}}{b_k^{ii} - b_k^{jj}}$$

и находим угол поворота α, где

$$\alpha \in \left(-\frac{\pi}{4}; \frac{\pi}{4}\right].$$

По формулам (3) определяем c и s; составляем матрицу T_k плоских вращений так, как было описано в п. 2.1 (т.е. заменяем в единичной матрице единицы на главной диагонали (в *i*-й и *j*-й строках) числом $c = \cos\alpha$, нули вне диагонали (индексы i, j и j, i) - числами $s = \sin\alpha$ и $-s = -\sin\alpha$). Наконец, вычисляем очередную *(k+1)*-ю итерацию по формуле

$$B_{k+1} = T_k^T B_k T_k. \tag{4}$$

Таким образом, на каждом шаге обнуляются максимальные по модулю недиагональные элементы, и последовательность матриц стремится к диагональной.

2.3. Сходимость и оценка погрешности

Теперь надо доказать сходимость и оценить погрешность. Все матрицы B_k симметричны. Рассмотрим матрицу VB_k недиагональных элементов матрицы B_k. Она получается заменой в B_k диагональных элементов нулями. Нам известно, что b_k^{ij} - наибольший по модулю недиагональный элемент матриц B_k и VB_k (их два на самом деле, они симметричны относительно главной диагонали); B_{k+1} получается из B_k обнулением двух равных недиагональных элементов b_k^{ij}=b_k^{ji}. Недиагональные элементы вне строк и столбцов i, j совпадают.

Используем при доказательстве и оценке евклидову норму матрицы:

$$\|B_k\| = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{n} \left(b_k^{ij}\right)^2}.$$

Надо доказать, что

$$\|VB_k\|^2 \xrightarrow[k\to\infty]{} 0.$$

В силу того, что элементы b_k^{ij}=b_k^{ji} – наибольшие по модулю из недиагональных, квадрат b_k^{ij} не меньше среднего квадрата недиагональных элементов, т.е. верно неравенство

$$\left(b_k^{ij}\right)^2 \geq \frac{1}{n^2-n}\|VB_k\|^2 \tag{5}$$

($n^2 - n$ – число недиагональных элементов). Далее, поскольку B_{k+1} получается из B_k обнулением двух равных недиагональных элементов b_k^{ij}=b_k^{ji} и заменой элементов строк и столбцов i, j, квадраты норм VB_k и VB_{k+1} связаны соотношением

$$\|VB_{k+1}\|^2 = \|VB_k\|^2 - 2\left(b_k^{ij}\right)^2, \tag{6}$$

которое можно проверить непосредственным вычислением B_{k+1}^{ls}, l, $s \notin \{i;j\}$. Из (6) выражаем квадрат b_k^{ij} и подставляем в (5):

$$\left(b_k^{ij}\right)^2 = \frac{\|VB_k\|^2 - \|VB_{k+1}\|^2}{2} \Rightarrow \|VB_k\|^2 - \|VB_{k+1}\|^2 \geq \frac{2}{n^2-n}\|VB_k\|^2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \|VB_{k+1}\|^2 \leq \left(1 - \frac{2}{n^2-n}\right)\|VB_k\|^2.$$

Получаем неравенство, связывающее квадраты норм матриц VB_{k+1} и VB_k. Применяем его последовательно к VB_k, VB_{k-1} и т.д.:

$$\|VB_k\|^2 \leq \left(1 - \frac{2}{n^2-n}\right)\|VB_{k-1}\|^2 \leq \cdots \leq \left(1 - \frac{2}{n^2-n}\right)^k \|VB_0\|^2 =$$

$$= \left(1 - \frac{2}{n^2-n}\right)^k \|VA\|^2. \tag{7}$$

Матрица $VB_0 = VA$ – матрица недиагональных элементов исходной матрицы A. Получили оценку квадрата нормы VB_k, т.е. суммы квадратов недиагональных элементов матрицы B_k. Поскольку

$$0 < 1 - \frac{2}{n^2 - n} < 1$$

при $n > 2$, то величина в скобках в (7) положительна и меньше единицы при $n > 2$, её положительная степень стремится к нулю, а значит, в силу оценки (7) квадрат нормы VB_k также стремится к нулю:

$$\left(1 - \frac{2}{n^2 - n}\right)^k \|VA\|^2 \xrightarrow[k\to\infty]{} 0 \;\Rightarrow\; \|VB_k\|^2 \xrightarrow[k\to\infty]{} 0.$$

Итак, доказано, что процесс преобразований вращения приводит к тому, что недиагональные элементы уменьшаются, стремясь в совокупности к нулю. Критерием останова итерационного процесса может служить условие

$$\|VB_k\|^2 \le \varepsilon,$$

где $\varepsilon > 0$ – заданная точность. Тогда полученная матрица B_k диагональная в пределах заданной точности, и на её диагонали – собственные числа исходной матрицы A.

2.4. Вычисление собственных векторов

Теперь вычислим собственные векторы. Выразим матрицу B_k через матрицы вращений и исходную матрицу A. Для этого применим расчётную формулу (4):

$$B_k = T_{k-1}^T B_{k-1} T_{k-1} = T_{k-1}^T T_{k-2}^T B_{k-2} T_{k-2} T_{k-1} = T_{k-1}^T T_{k-2}^T T_{k-3}^T B_{k-3} T_{k-3} T_{k-2} T_{k-1} =$$
$$= \cdots = T_{k-1}^T T_{k-2}^T \cdots T_0^T B_0 T_0 T_1 \cdots T_{k-1} = (T_0 T_1 \cdots T_{k-1})^T A (T_0 T_1 \cdots T_{k-1}) = T^T A T,$$

где $T = T_0 T_1 \cdots T_{k-1}$. Последовательно подставляя B_{k-1}, B_{k-2} и т.д. по формуле (4), получим

$$B_k = T^T A T, \tag{8}$$

T –это произведение всех матриц вращений $T_0 T_1 \cdots T_{k-1}$. В почти диагональной матрице B_k на главной диагонали стоят собственные числа λ_i матрицы A (на самом деле приближённые). Умножим (8) на *i*-й единичный координатный вектор $\bar{e}_i$:

$$B_k \bar{e}_i = T^T A T \bar{e}_i.$$

Произведение $B_k \bar{e}_i$ есть *i*-столбец матрицы B_k, т.е. $\lambda_i \bar{e}_i$ (в нём все элементы – нули, кроме *i*-го, равного λ_i), поэтому

$$\lambda_i \bar{e}_i = T^T A T \bar{e}_i. \tag{9}$$

Умножим (9) слева на матрицу T:

$$\lambda_i T \bar{e}_i = T T^T A T \bar{e}_i.$$

Она ортогональная как произведение ортогональных матриц вращений, поэтому $TT^T = E$. Следовательно,

$$\lambda_i T \bar{e}_i = A T \bar{e}_i.$$

Из последнего равенства делаем вывод, что $T\bar{e}_i$ – собственный вектор матрицы A, соответствующий собственному числу λ_i. А это есть не что иное, как i-столбец матрицы T.

Итак, получается, что собственные векторы A – столбцы матрицы T, равной произведению всех матриц вращений от начального до последнего шага.

Пример. Вычислим собственные числа и векторы матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Шаг 1. Наибольший недиагональный элемент матрицы A есть $a_{31} = 2$. Вычисляем угол поворота

$$\varphi = \frac{1}{2}\operatorname{arctg}\left(2\frac{a_{31}}{a_{11} - a_{33}}\right) = 0{,}55357.$$

Строим матрицу вращений

$$T_0 = \begin{pmatrix} c & 0 & -s \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & c \end{pmatrix},$$

где $c = \cos\varphi$, $s = \sin\varphi$. Вычисляем следующую итерацию $B_1 = T_0^T A T_0$. Результат показан на рис. 1.

$$B1 := T0^{\mathrm{T}} \cdot A \cdot T0 = \begin{bmatrix} 4.2360679775 & 1.90211303259 & 4.440892098501 \cdot 10^{-16} \\ 1.90211303259 & 3 & 1.175570504585 \\ 8.326672684689 \cdot 10^{-17} & 1.175570504585 & -0.2360679775 \end{bmatrix}$$

Рис. 1. Результат шага 1 примера на с. 8

Элементы $b_{31} = b_{13}$ - нулевые.

Шаг 2. Наибольший недиагональный элемент матрицы B_1 есть b_{21}. Вычисляем

$$\varphi = \frac{1}{2}\operatorname{arctg}\left(2\frac{a_{21}}{a_{11} - a_{22}}\right) = 0{,}62832.$$

Строим матрицу

$$T_1 = \begin{pmatrix} c & -s & 0 \\ s & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Вычисляем $B_2 = T_1^T B_1 T_1$. Результат на рис. 2.

$$B2 := T1^{\mathrm{T}} \cdot B1 \cdot T1 = \begin{bmatrix} 5.61803398875 & 0 & 0.690983005625 \\ 1.110223024625 \cdot 10^{-16} & 1.61803398875 & 0.951056516295 \\ 0.690983005625 & 0.951056516295 & -0.2360679775 \end{bmatrix}$$

Рис. 2. Результат шага 2 примера на с. 8

Шаг 3. Аналогично вычисляем $B_3 = T_2^T B_2 T_2$ (рис. 3).

$$B3 := T2^{\mathrm{T}} \cdot B2 \cdot T2 = \begin{bmatrix} 5.61803398875 & 0.268501943559 & 0.636682197307 \\ 0.268501943559 & 2.019114031729 & -1.110223024625 \cdot 10^{-16} \\ 0.636682197307 & 1.387778780781 \cdot 10^{-16} & -0.637148020479 \end{bmatrix}$$

Рис. 3. Результат шага 3 примера на с. 8

Шаг 4. Аналогично вычисляем $B_4 = T_3^T B_3 T_3$ (рис. 4).

$$B4 := T3^{\mathrm{T}} \cdot B3 \cdot T3 = \begin{bmatrix} 5.682180710283 & 0.267149466563 & -1.110223024625 \cdot 10^{-16} \\ 0.267149466563 & 2.019114031729 & -0.026915724221 \\ -2.498001805407 \cdot 10^{-16} & -0.026915724221 & -0.701294742012 \end{bmatrix}$$

Рис. 4. Результат шага 4 примера на с. 8

Шаг 5. Аналогично вычисляем $B_5 = T_4^T B_4 T_4$ (рис. 5).

$$B5 := T4^{\mathrm{T}} \cdot B4 \cdot T4 = \begin{bmatrix} 5.701561526327 & 5.551115123126 \cdot 10^{-17} & -0.001947529135 \\ 2.775557561563 \cdot 10^{-17} & 1.999733215685 & -0.026845173507 \\ -0.001947529135 & -0.026845173507 & -0.701294742012 \end{bmatrix}$$

Рис. 5. Результат шага 5 примера на с. 8

Шаг 6. Аналогично вычисляем $B_6 = T_5^T B_5 T_5$ (рис. 6).

$$B6 := T5^{\mathrm{T}} \cdot B5 \cdot T5 = \begin{bmatrix} 5.701561526327 & 0.000019353377 & -0.001947432971 \\ 0.000019353377 & 2.000000000101 & -3.469446951954 \cdot 10^{-18} \\ -0.001947432971 & 2.593411596585 \cdot 10^{-16} & -0.701561526428 \end{bmatrix}$$

Рис. 6. Результат шага 6 примера на с. 8

С точностью $0{,}002$ матрицу B_6 можно считать диагональной. Собственные числа – диагональные элементы $5{,}702$, $2{,}000$, $-0{,}702$.

Вычислим собственные векторы. Для этого считаем матрицу $T = T_0 T_1 \dots T_5$. Собственные векторы – в столбцах полученной матрицы (рис. 7).

$$T0 \cdot T1 \cdot T2 \cdot T3 \cdot T4 \cdot T5 = \begin{bmatrix} 0.60580560699 & -0.707103612407 & -0.364697200237 \\ 0.605798212867 & 0.707109949947 & -0.364697194907 \\ 0.515759722959 & 0.000002693387 & 0.856733277144 \end{bmatrix}$$

Рис. 7. Матрица собственных векторов примера на с. 8