(В частности при $\omega = 1$ обеспечена сходимость метода Зейделя).
в) метод Якоби: $B = D$ и $\tau = 1$

$$B - \frac{\tau A}{2} = D - \frac{A}{2} > 0, \quad \Rightarrow \quad A < 2D. \tag{27}$$

Сформулируем достаточные условия сходимости метода Якоби
Теорема 4. *Если A симметричная положительно определённая матрица с диагональным преобладанием*

$$a_{ii} > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \tag{28}$$

то метод Якоби сходится (в среднеквадраитичной метрике).
Действительно, покажем, что в таком случае выполнено неравенство (27):

$$(Ax, x) = \sum_{ij} a_{ij} x_i x_j \leq \sum_{ij} |a_{ij}||x_i||x_j| \leq \left| \begin{matrix} \text{учтём, что} \\ |x_i||x_j| \leq \frac{|x_i|^2 + |x_j|^2}{2} \end{matrix} \right| \leq$$

$$\leq \frac{1}{2} (\sum_{ij} |a_{ij}||x_i|^2 + \sum_{ij} |a_{ij}||x_j|^2) = \left| \begin{matrix} \text{в силу} \\ \text{симметрии} \\ a_{ij} = a_{ji} \end{matrix} \right| =$$

$$= \sum_i |x_i|^2 (a_{ii} + \sum_{j \neq i} |a_{ij}|) < \sum_i |x_i|^2 2a_{ii} = 2(Dx, x).$$

Таким образом $A < 2D$ что и требовавлось доказать ■

II. Алгебраическая проблема собственных значений

§1. Собственные значения (с.з.) и собственные векторы (с.в.) квадратной матрицы. Прямые методы

1.1 Основные понятия

Напомним:*Ненулевой вектор $\overrightarrow{x} \neq 0$ называется собственным вектором матрицы A, отвечающим собственному значению λ, если*

$$Ax = \lambda x, \quad x \neq 0. \tag{1}$$

В дальнейших рассуждениях мы будем считать, что $\overrightarrow{x} \in C_n$, A–квадратная комплексная матрица, задающая отображение$A : C_n \Rightarrow C_n$; $\lambda \in C$. Хотя, как правило, матрица A, $\overrightarrow{x}$ и λ — будут вещественны (в наших приложениях).
Необходимое и достаточное условие нетривиальной разрешимости (1):

$$\det(A - \lambda E) = 0. \tag{2}$$

Многочлен

$$p(\lambda) = P_n(\lambda) = \det(A - \lambda E)$$

называется характеристическим многочленом матрицы A.
Будем сразу же предполагать, что:

- Собственные векторы $\vec{x}$ нормированы, т. е. $\|\overrightarrow{x}\| = \sqrt{(x, x)} = 1$;
- Известно, что если *все* собственные значения матрицы A простые (не кратные), то она имеет n линейно независимых (ЛНЗ) собственных векторов, т. е. в этом случае существует базис в C_n из собственных векторов матрицы A.
- Если среди собственных значений есть кратные, то

  1) Собственные вектора, отвечающие различным (не комплексно сопряженным) собственным значения — линейно независимы;

  2) Собственных векторов для λ_i кратности α_i может и не быть α_i штук;
- Поскольку

  $$\overline{\det(A - \lambda E)} = \det\left(\overline{A - \lambda E}\right) = \det\left(\overline{A - \lambda E}\right)^T = \det\left(\overline{A}^T - \overline{\lambda} E\right) = \det\left(\overline{A^T} - \overline{\lambda} E\right),$$

  то, если λ — собственное значение матрицы A, то $\overline{\lambda}$ — собственное значение сопряжённой матрицы $\left(\overline{A^T}\right) \equiv A^*$.
- Собственные векторы сопряженных матриц, отвечающие различным (не комплексно сопряженным) собственным значениям — *ортогональны*.
- У эрмитовских матриц ($A^* = A$) все собственные значения *вещественны*, а собственные векторы образуют после ортогонализации *ортонормированную систему* (ОНС) и если матрица $A > 0$ (положительно определенная), то существует базис из собственных векторов матрицы A.

1.2 Устойчивость невырожденной задачи нахождения собственных векторов и собственных значений

Пусть собственные векторы матрицы A образуют базис в C_n и данное собственное значение λ_k — простое. Тогда возмущенная погрешностями задача (1) имеет вид:

$$(A + \delta A)(x_k + \delta x_k) = (\lambda_k + \delta\lambda_k)(x_k + \delta x_k).$$

Линеаризуя по возмущениям δA, $\delta\lambda_k$, $\delta\overrightarrow{x_k}$ и учтя, что $Ax_k = \lambda_k x_k$, найдем:

$$A\,\delta x_k + \delta A\;x_k = \lambda_k\;\delta x_k + \delta\lambda_k\;x_k. \tag{$*$}$$

Поскольку собственные векторы нормирваны $\|x_k\|^2 = (x_k, x_k) = 1$, то варьируя это равенство найдем $(\delta x_k, x_k) = 0$ (δx_k и x_k ортогональны.)
В таком случае в разложении δx_k по невозмущенному базису $\{x_i\}$ коэффициент $\alpha_{kk} = 0$, имеем

$$\delta x_k = \sum_{i=1}^{n}{}' \alpha_{ki} x_i,$$

Штрих у суммы означает, что $i \notin defind\{k\} = \{k\}$. Тогда

$$A \sum_{i=1}^{n}{}' \alpha_{ki} \overrightarrow{x_i} + \delta A\ \vec{x}_k = \lambda_k \sum_{i=1}^{n}{}' \alpha_{ki} \overrightarrow{x_i} + \delta\lambda_k\ \vec{x}_k. \qquad (**)$$

Теперь умножим (**) скалярно (т. е. справа) на собственный вектор y_l сопряжённой матрицы A^*, получим:
1) $l = k$, y_k — собственный вектор для $\overline{\lambda_k}$:

$$\overbrace{\left(A \sum_{i=1}^{n}{}' \alpha_{ki} \overrightarrow{x_i}, y_k\right)}^{\left(A \sum'_{i\neq k} \alpha_{ki} \overrightarrow{x_i}, y_k\right) = 0 \text{ ибо } \perp y_k} + (\delta A\ x_k, y_k) = \overbrace{\left(\lambda_k \sum_{i=1}^{n}{}' \alpha_{ki} \overrightarrow{x_i}, y_k\right)}^{\equiv 0} + \delta\lambda_k (x_k, y_k).$$

$$\Updownarrow$$

$$(\delta A\ x_k, y_k) = \delta\lambda_k (x_k, y_k).$$

Или

$$|\delta\lambda_k| \le \frac{|(\delta A\ x_k, y_k)|}{|(\ x_k, y_k)|} \le \frac{\|\delta A\ x_k\|\ \ \|y_k\|}{|(\ x_k, y_k)|} \le \frac{\|\delta A\ \|\ \ \|x_k\|\ \ \|y_k\|}{|(\ x_k, y_k)|} \le$$

$$\max_{i,j}\ |\delta a_{i,j}|\ \underbrace{\frac{\sqrt{(x_k, x_k)(y_k, y_k)}}{|(x_k, y_k)|}}_{\varkappa_{k,k}} \equiv \varkappa_{k,k} \max_{i,j}\ |\delta a_{i,j}|. \qquad (3)$$

здесь $\varkappa_{k,k}$ — k-ый главный коэффициент перекоса матрицы A.
2) Аналогично $l \neq k$:

$$\overbrace{\left(\sum_{i=1}^{n}{}' \alpha_{ki} \lambda_i \overrightarrow{x_i}, y_l\right)}^{\text{остается лишь } i=l} + (\delta A\ x_k, y_l) = \left(\lambda_k \sum_{i=1}^{n}{}' \alpha_{ki} \overrightarrow{x_i}, y_l\right) + \overbrace{\delta\lambda_k (\ x_k, y_l)}^{\equiv 0\ x_k \perp y_k}$$

$$\alpha_{kl}\lambda_l\ (x_l, y_l) + (\delta A\ x_k, y_l) = \lambda_k \alpha_{kl}\ (x_l, y_l).$$

Откуда получаем

$$\alpha_{lk} (\lambda_k - \lambda_l) (x_l, y_l) = (\delta A\ x_k, y_l).$$

Теперь мы можем получить оценку коэффициентов α_{kl}

$$|\alpha_{kl}| \le \frac{|(\delta A\ x_k, y_l)|}{|(\lambda_k - \lambda_l)|\ \ |(x_l, y_l)|} \le \frac{\max_{i,j} |\delta a_{i,j}|}{|(\lambda_k - \lambda_l)|} \frac{\sqrt{(x_k, x_k)(y_l, y_l)}}{|(x_l, y_l)|} =$$

$$= \frac{\varkappa_{k,l}}{|(\lambda_k - \lambda_l)|} \max_{i,j}\ |\delta a_{i,j}|. \qquad (4)$$

Итак:

1) собственное значение λ_k матрицы A устойчиво относительно возмущений матрицы, если соответствующий ему коэффициент перекоса $\varkappa_{k,k}$ мал;

2) Для устойчивости собственных векторов относительно возмущений матрицы A необходимо, чтобы *все* $\varkappa_{k,l}$ были малы.

3) Для эрмитовских матриц $A^* = A$, $x_i = y_i$ и все $\varkappa_{k,l} = 1$. Тем самым задача (1) нахождения собственных значений и собственных векторов устойчива относительно возмущений входных данных δA.

1.3 Вычисление собственных значений (метод интерполяции)

Для нахождения собственных значений матрицы A используют её *характеристический многочлен*

$$p_n(\lambda) \equiv \det(A - \lambda E).$$

Можно любыми методами искать корни этого многочлена, т. е. решение уравнение (2)

$$p_n(\lambda) = 0.$$

Из общих соображений удобен *метод парабол*, поскольку он может обеспечить сходимость к комплексному корню характеристического уравнения (2) при действительном начальном приближении.

Как строить $p(\lambda)$? Естественно представить $p(\lambda)$ в виде интерполяционного многочлена, используя сетку значений $\{\lambda_i\}_{i=\overline{0,n}}$ (здесь λ_i — узел интерполяционной сетки, а не собственное значение матрицы A).

Сетку $\{\lambda_i\}$ выгодно брать на интервале $[-\|A\|, \|A\|]$ поскольку $\forall i$ $|\lambda| \leq \|A\|$. Тогда

$$p_n(\lambda) = \det(A - \lambda E) = L_n(\lambda) = \left| \begin{array}{c} \text{точное} \\ \text{равенство ибо} \\ \text{это полином} \\ \text{порядка } n \end{array} \right| =$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \overbrace{p_n(\lambda_k)}^{=\det(A-\lambda_k E)} \frac{\omega(\lambda)}{\omega\prime(\lambda_k)\,(\lambda - \lambda_k)}, \tag{5}$$

где $\omega(\lambda) = \prod\limits_{i=0}^{n}(\lambda - \lambda_i)$.

Вычисления по формуле (5) требуют $O(\frac{2}{3}n^4)$ действий.

В практике вычислений предпочтительнее следующая тактика поведения: Известно, что матрицу общего вида преобразованием *подобия* P можно привести к 3-х –диагональной матрице, т .е. $\exists P, \quad \det P \neq 0$ такая, что

$$B = P^{-1}AP$$

3-х -диагональная матрица. Тогда, если собственные значения и собственные векторы матрицы B известны, то

$$By = \alpha y \quad \Longleftrightarrow \quad P^{-1}APy = \alpha y \quad \Longleftrightarrow \quad A(Py) = \alpha(Py)$$

или

$$Ax = \alpha x.$$

Таким образом собственные значения исходной матрицы A и матрицы B совпадают

$$\lambda_i = \alpha_i,$$

а собственный вектор x_i, отвечающий данному значению λ_i строиться через собственный вектор y_i

$$x_i = Py_i. \tag{6}$$

Для нахождения собственных значений матрицы B, т.е. корней характеристического многочлена $P_B(\alpha) = 0$, для *метода интерполяции* необходимо вычисление определителя $\det(B - \alpha E)$ в узлах сетки $\{\alpha_i\}$. Эти вычисления можно реализовать по экономичной расчётной схеме, что весьма важно. Именно

$$D_m(\alpha) = \left| \begin{array}{c|c|c} & & 0 \\ D_{m-2} & & \cdot \\ & & \cdot \\ & & 0 \\ \hline \quad\quad b_{m-1,m-2} & b_{m-1,m-1} - \alpha & b_{m-1,m} \\ \hline & b_{m,m-1} & b_{m,m} - \alpha \end{array} \right| =$$

$$= (b_{m,m} - \alpha) \cdot D_{m-1}(\alpha) - b_{m,m-1} \cdot b_{m-1,m} \cdot D_{m-2}(\alpha).$$

Итак, мы получили рекурентные формулы вычисления характеристического многочлена 3-х –диагональной матрицы

$$\left\{ \begin{array}{c} D_m(\alpha) = (b_{m,m} - \alpha) D_{m-1} - b_{m,m-1} \cdot b_{m-1,m} \cdot D_{m-2}(\alpha) \\ D_{-1} = 0; \quad D_0 = 1 \end{array} \right. \tag{7}$$

Задача. *Убедиться, что (7) дает правильную рекуррентную формулу для* $D_m(\alpha)$.
Однократное вычисление $P_B(\alpha_i) \equiv D_n(\alpha_i)$ требует $O(5n)$ действий, следовательно для десяти итераций метода парабол $\sim O(50n^2)$.

1.4 Нахождение собственных векторов (метод обратной итерации)

Если собственное значение λ_k матрицы A известно, то соответствующие ему собственные векторы $\vec{x}_k$ находятся из решения совместной СЛАУ (1). Однако:

-на решении СЛАУ с вырожденной матрицей мы не останавлилвались;

-особенно хорошего результата от непосредственного применения методов предыдущей части к решению (1) ожидать нельзя, ибо, поскольку, в силу различного рода погрешностей, λ_k известно неточно $\tilde{\lambda}_k$, то формально $\det\left(A - \tilde{\lambda}_k E\right) \neq 0$. Тем самым её решение должно тождественно равняться нулю $\tilde{x}_k \equiv 0$.

Поэтому для решения задачи (1) используют другие соображения:

Метод обратной итерации: Выберем прозвольно вектор x_0 и рассмотрим СЛАУ

$$\left(A - \tilde{\lambda}_k E\right) x = x_0. \qquad (*)$$

Поскольку $det\ \left(A - \tilde{\lambda}_k E\right) \neq 0$, то у СЛАУ (*) существует единственное решение x . Покажем, что это решение "почти" собственный вектор x_k.
Пусть, как и прежде, A имеет n линейно независимых собственных векторов $\{x_i\}_{i=\overline{1,n}}$ — базис. Пусть λ_k — простое собственное значение (нам дано!). Тогда решение x и вектор x_0 можно разложить по базису из собственных векторов $\{x_i\}$

$$x = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i, \qquad x_0 = \sum_{i=1}^{n} \beta_i x_i.$$

Найдем α_i

$$Ax - \tilde{\lambda}_k x = \sum_i \alpha_i \lambda_i x_i - \sum_i \tilde{\lambda}_k \alpha_i x_i = \sum_i \beta_i x_i.$$

В силу единственности разложения по выбранному базису

$$\alpha_i \left(\lambda_i - \tilde{\lambda}_k\right) = \beta_i \quad \Leftrightarrow \quad \alpha_i = \frac{\beta_i}{\lambda_i - \tilde{\lambda}_k} \qquad (**)$$

Итак мы получили, что все коэффициенты α_i в разложении вектора x относительно малы, кроме α_k (в знаменателе дроби (**) стоит при $i = k$ малая величина).

Найденный вектор $\vec{x}$ нужно обязательно нормировать и провести несколько итераций

$$\begin{cases} \left(A - \tilde{\lambda}_k E\right) \overset{(s)}{\vec{x}_k} = \overset{(s-1)}{\vec{x}_k}\ ; \quad \overset{(0)}{\vec{x}_k} = \vec{x}_0 \\ \qquad\qquad |\overset{(s)}{\vec{x}_k}| = 1. \end{cases} \qquad (8)$$

Замечания:

-Обычно достаточно $2^x \div 3^x$ итераций (с нормировкой !) для достижения приемлемой точности;

-В случае кратных собственных значений, если собственные векторы образуют базис, то $\vec{x} \in Lin\,(\overset{(k)}{\vec{x}_1}, \ldots, \overset{(k)}{\vec{x}_{\alpha_k}})$ и для линейно независимых начальных значений $\{\vec{x}_0\}_{\overline{1,\alpha_k}}$ найдём α_k линейно независимых собственных векторов в этой оболочке.

§2. Итерационный метод вращений (Якоби) нахождения собственных векторов и собственных значений симметричной матрицы

2.1 Редукция

Известно, что для действительной симметричной матрицы $A^T = A$ существует ортогональное преобразование U такое, что

$$U^T A U = diag\left(\lambda_1, ..., \lambda_n\right) = \Lambda.$$

(частный случай преобразования подобия $U^{-1} = U^T$).

У матрицы Λ собственными векторами являются базисные векторы $\vec{e}_i = \{0, 0, ..., 1, 0, ..., 0\}$ ибо

$$\Lambda \vec{e}_i = \lambda_i \vec{e}_i \quad \Leftrightarrow \quad \left(U^T A U\right) \vec{e}_i = \lambda_i \vec{e}_i \quad \Leftrightarrow \quad A\left(U \vec{e}_i\right) = \lambda_i \left(U \vec{e}_i\right).$$

Таким образом λ_i — собственные значения матрицы A, а

$$\vec{x}_i = U \vec{e}_i$$

собственные векторы исходной матрицы A, отвечающие собственному значению λ_i.

2.2 Построение матрицы вращения U

В методе Якоби матрица U строится итерационно, через последовательность элементарных вращений. Рассмотрим вращение в плоскости (Okl)

$$U_{k,l}\left(\varphi\right) = \left(\begin{array}{ccccccccccc}
1 & & 0 & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & 0 & & & & 0 & \\
0 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & \cos\varphi & & & & -\sin\varphi & & & \\
 & & & & 1 & & 0 & & & & \\
 & 0 & & & & \ddots & & & & 0 & \\
 & & & & 0 & & 1 & & & & \\
 & & & \sin\varphi & & & & \cos\varphi & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & 0 & & & & 0 & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{array}\right), \quad \tilde{A} = U_{kl}^T A U_{kl}.$$

И определим φ из условия $\left(\tilde{A}\right)_{kl} = \left(\tilde{A}\right)_{lk} = 0$. Найдем $\left(\tilde{A}\right)_{kl}$:

1) Матрица $B = AU_{kl}$ отличается от A двумя столбцами k-ым и l-ым (все остальные столбцы в U единичные):

$$b_{ik} = \sum_j a_{ij} \left(U_{kl}\right)_{jk} = a_{ik} \cos\varphi + a_{il} \sin\varphi$$

$$b_{il} = \sum_j a_{ij}(U_{kl})_{jl} = a_{ik}\,(-\sin\varphi) + a_{il}\cos\varphi.$$

2) Матрица $\tilde{A} = U^T B$ — отличается от B двумя строками: k-ой и l-ой:

$$\left(\tilde{A}\right)_{ki} = \sum_j (U_{kl}^T)_{kj} b_{ji} = \cos\varphi \cdot b_{ki} + \sin\varphi \cdot b_{li}$$

$$\left(\tilde{A}\right)_{li} = \sum_j (U_{kl}^T)_{lj} b_{ji} = (-\sin\varphi) \cdot b_{ki} + \cos\varphi \cdot b_{li}$$

Итак:

$$\left(\tilde{A}\right)_{kl} = \cos\varphi \cdot b_{kl} + \sin\varphi \cdot b_{ll} = \cos\varphi\,(a_{kk}\,(-\sin\varphi) + a_{kl}\cos\varphi) + \sin\varphi\,(a_{lk}\,(-\sin\varphi) + a_{ll}\cos\varphi) =$$

$$= a_{kl}\cos 2\varphi - (a_{kk} - a_{ll})\,\frac{1}{2}\sin 2\varphi = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \operatorname{tg} 2\varphi = \frac{2a_{kl}}{a_{kk} - a_{ll}};^{*1)} \quad |\varphi| < \pi/4, \qquad (9)$$

элементарное вращение $U_{kl}(\varphi)$ определено.

2.3 Инвариантность сферической нормы матрицы при элементарном вращении

Рассмотрим сферическую норму матрицы A

$$S = \|A\|_E^2 = \sum_{i,j} |a_{ij}|^2 = \sum_{i,j} a_{ij}^2$$

(A — вещественная матрица).
Лемма. *Величина S не изменяется при вращении $U_{kl}(\varphi)$.*
Действительно:

1) Преобразование $B = AU$ изменяет лишь два столбца k-ый и l-ый в матрице A, причём $b_{ik}^2 + b_{il}^2 = a_{ik}^2 + a_{il}^2$ и в S нет изменения;

2) Преобразование $\tilde{A} = U^T B$ изменяет лишь две строки в матрице B, причём $\tilde{a}_{ki}^2 + \tilde{a}_{li}^2 = b_{ki}^2 + b_{li}^2$ и в S нет изменений.
Таким образом

$$\left\|\tilde{A}\right\|_E = \left\|U^T B\right\|_E = \|B\|_E = \|AU\|_E = \|A\|_E\,,$$

что и требовалось показать ■

Теперь выделим в S внедиагональные элементы

$$S = \|A\|_E^2 = S_1 + S_2 = \sum_i a_{ii}^2 + \overbrace{\sum_{\substack{i,j\\ i\neq j}} a_{ij}^2}^{\text{внедиаг. эл-ты}}\,.$$

При повороте $U_{kl}(\varphi)$ (9) часть $S_2\downarrow$ — убывает, следовательно часть $S_1\uparrow$ — растет.

$^{*1)}$Если разность $a_{kk} - a_{ll}$ в (9) равена нулю, то $\cos 2\varphi = 0$ и $\varphi = \pi/4$.

Нужно подобрать такую последовательность вращений, чтобы $S_2 \to 0$ и при этом $\tilde{A}$ станет диагональной матрицей.

Выгодно уничтожать при очередном вращении наибольший по модулю внедиагональный элемент.

Для уменьшения объема вычислений поступают так:

1) Составим суммы строк (полустрок) и найдем строку с наибольшей суммой

$$S_i = \sum_{\substack{j \\ j \neq i}} a_{ij}^2 \quad \Rightarrow \quad S_{i_{\max}}.$$

2) В $i_{\max}$-строке найдем наибольший по модулю элемент

$$\left| a_{i_{\max}, j_{\max}} \right|.$$

3) Его и будем исключать на очередном шаге

$$k = i_{\max}, l = j_{\max}.$$

Тогда $S_2 \downarrow$ не менее, чем на $\frac{1}{n-1}$ от всей суммы $S_{i_{\max}}$, т. е. на $\frac{1}{n-1}$ от $\frac{1}{n} S_2 \Rightarrow$ итого на долю $\frac{2}{n(n-1)} S_2$ (ибо исключаются два слагаемых). После N исключений

$$S_2^{(N)} \approx \left(1 - \frac{2}{n\,(n-1)} \right)^N S_2 \approx e^{-\frac{2}{n^2} N} S_2, \quad S_2^{(N)} \to 0, \quad N \to \infty.$$

Замечания:

Процесс Якоби с выбором оптимального элемента сходится к диагональной матрице Λ.

Матрица вращений Якоби на N-ой итерации дается произведением

$$U = \prod_{i=1}^{N} U_{k_i, l_i}.$$

Её столбцами являются приближения координат собственных векторов матрицы A.

Имеет место оценка числа арифметических действий для нахождения *всех* собственных значений матрицы A — $O\left(30 n^2\right)$.