

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра _____ компьютерной алгебры и теории чисел

Несимметричная проблема собственных значений

АВТОРЕФЕРАТ ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Студентки _____ 4 _____ курса _____ 421 _____ группы

направления _____ 02.03.01 Математика и компьютерные науки

_____ механико-математического факультета

_____ Яровой Анастасии Анатольевны

Научный руководитель
доцент, к.ф.-м.н.

подпись, дата

_____ Е.В. Коробченко

Заведующий кафедрой
зав. кафедрой, к.ф.-м.н.,
доцент

подпись, дата

_____ А.М. Водолазов

Саратов 2020

Введение. Бакалаврская работа посвящена изучению несимметричной проблемы собственных значений. Нахождение собственных значений является задачей вычислительной математики, интерес к которой не угасает уже много десятилетий. Задачи такого рода, с одной стороны, достаточно часто возникают в разнообразных инженерных расчетах, приводя к матрицам больших размерностей; с другой стороны, имеют кубическую зависимость объема вычислений от размера задачи, что требует существенного времени счета даже на современных быстродействующих ЭВМ. Универсального алгоритма, который обеспечивает эффективное решение задачи в любой ее постановке, не существует. Многие из алгоритмов, которые существуют сейчас, проходили длительный путь от их первоначального до современного вида, возникшего благодаря многократным совершенствованиям и теоретическим исследованиям.

Цель данной работы заключается в отыскании алгоритма с достаточно высокой скоростью сходимости, способного устойчиво решать проблему нахождения собственных значений несимметричной матрицы.

Бакалаврская работа состоит из трех разделов. Название первого раздела: предварительные основные сведения. Она в свою очередь состоит из трех подразделов, а именно: основные сведения о собственных значениях и собственных векторах, матричные разложения и канонические формы. Второй раздел называется: теория возмущений. И третий раздел носит название: алгоритмы для несимметричной проблемы собственных значений. Данный раздел состоит из следующих подразделов: степенной метод, обратная итерация, ортогональная итерация, QR-итерация.

Основное содержание работы. Пусть k — основное поле и $k[\lambda]$ — кольцо многочленов от неизвестного λ .

Определение 1.1. λ — матрицей (многочленной матрицей) над полем k называется матрица, элементами которой являются элементы кольца $k[\lambda]$, то есть многочлены от λ с коэффициентами из поля k .

Определение 1.2. Характеристической матрицей для квадратной скалярной матрицы A называется λ — матрица вида $\lambda I - A$, то есть

$$\lambda I - A = \begin{pmatrix} \lambda - \alpha_{11} & -\alpha_{12} & \cdots & -\alpha_{1n} \\ -\alpha_{21} & \lambda - \alpha_{22} & \cdots & -\alpha_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\alpha_{n1} & -\alpha_{n2} & \cdots & \lambda - \alpha_{nn} \end{pmatrix}.$$

Определение 1.3. Характеристическим многочленом для скалярной матрицы A называется определитель, порожденный характеристической матрицей для матрицы A .

Характеристический многочлен матрицы A будем обозначать через $p(\lambda) = \det(\lambda I - A)$. Корни уравнения $p(\lambda) = 0$ называются собственными значениями этой матрицы.

Определение 1.4. Характеристическими корнями (числами) матрицы A называются все n корней ее характеристического многочлена, лежащие, вообще говоря, в алгебраическом замыкании основного поля k .

Определение 1.5. Пусть A — квадратная числовая матрицы, сопряженно транспонированной для матрицы A называется матрица $A^* = \overline{A^T}$, где A^T означает транспонирование, а $\overline{A}$ замену матрицы A комплексно сопряженными.

Определение 1.6. Действительная (комплексная) квадратная матрица называется ортогональной (унитарной), если она взаимнообратна со своей сопряженно транспонированной матрицей A^* , то есть $A^{-1} = A^*$.

Определение 1.7. Ненулевой вектор x , удовлетворяющий условию, что $Ax = \lambda x$, называется правым собственным вектором, соответствующим собственному значению λ . Ненулевой вектор y , такой, что $y^* A = \lambda y^*$, называется левым собственным вектором.

Теорема 1.1. Для того, чтобы скаляр λ был собственным значением матрицы необходимо и достаточно, чтобы λ был характеристическим корнем матрицы A , лежащим в основном поле.

В работе подробно рассматривается QR-разложение матриц.

Теорема 1.2. Пусть A — матрица размера $m \times n$, причем $m \geq n$. Предположим, что A имеет полный столбцовый ранг. Тогда существуют и единственны $m \times n$ -матрица Q с ортонормированными столбцами (т. е. $Q^T Q = I_n$) и

верхнетреугольная $n \times n$ -матрица R с положительными диагональными элементами r_{ii} , такие, что $A = QR$.

Для устойчивости вычисления QR-разложения предлагается алгоритм, основанный на использовании некоторых легко вычисляемых ортогональных матриц, называемых отражениями Хаусхолдера.

Определение 1.8. Преобразованием Хаусхолдера (отражением) называется матрица вида $P = I - 2uu^T$, где $\|u\|_2 = 1$.

Заметим, что $P = P^T$. Действительно, $P^T = (I - 2uu^T)^T = I^T - 2(u^T)^T u^T = I - 2uu^T = P$. Рассмотрим $PP^T = (I - 2uu^T)(I - 2uu^T) = I - 2uu^T - 2uu^T + 4uu^T uu^T = I$. Значит P — симметрична и ортогональна. Она называется отражением, потому что вектор Px является отражением вектора x относительно плоскости, проходящей через 0 перпендикулярно к u .

Пусть дан вектор x . Тогда легко найти отражение $P = I - 2uu^T$, аннулирующее в векторе x все компоненты, кроме первой: $Px = [c, 0, \dots, 0]^T = c \cdot e_1$. Это можно сделать следующим образом. Имеем $Px = x - 2u(u^T x) = c \cdot e_1$, поэтому $u = \frac{1}{2(u^T x)}(x - ce_1)$, т. е. u есть линейная комбинация векторов x и e_1 . Так как $\|x\|_2 = \|Px\|_2 = |c|$, то u должен быть параллелен вектору $\tilde{u} = x \pm \|x\|_2 e_1$, откуда $u = \tilde{u} / \|\tilde{u}\|_2$.

Заметим, что при любом выборе знака получится вектор u , удовлетворяющий соотношению $Px = e_1$, если $\tilde{u} \neq 0$. Следовательно, можем записать $\tilde{u} = x + \text{sgn}(x_1)e_1$, так как в этом случае не будет взаимного сокращения при вычислении первой компоненты в $\tilde{u}$.

Общий вид алгоритма QR-разложения, основанный на использовании отражений.

Алгоритм 1.1. QR-разложение посредством отражений:

for $i = 1$ to $\min m - 1, n$

$u_i = \text{Hous}(A(i : m, i))$

$P'_i = I - 2u_i u_i^T$

$A(i : m, i : n) = P'_i A(i : m, i : n)$

end for

Далее в работе рассматриваются канонические формы матриц; которые используются при отыскании собственных значений и собственных векторов.

Теорема 1.3. Для всякой матрицы A найдется невырожденная матрица S , такая, что матрица $S^{-1}AS = J$ имеет каноническую форму Жордана. Это означает, что J является блочно-диагональной матрицей, т.е. $J = \text{diag}(J_{n_1}(\lambda_1), J_{n_2}(\lambda_2), \dots, J_{n_k}(\lambda_k))$, причем

$$J_{n_i}(\lambda_i) = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ 0 & & & \lambda_i \end{bmatrix}^{n_i \times n_i}.$$

С точностью до перестановки диагональных блоков, матрица J определяется единственным образом.

Будем обозначать $J_m(\lambda)$ — жорданов блок с собственным значением λ алгебраической кратности m .

Жорданова форма дает нам полную информацию о собственных значениях, собственных векторах и инвариантных подпространствах матрицы. Однако реальное вычисление жордановой формы затруднено по двум причинам:

Первая причина: жорданова форма не является непрерывной функцией от A , поэтому ошибки округлений могут совершенно изменить ее.

Пример 1.3. Пусть матрица уже имеет жорданову форму

$$J_n(0) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Взяв произвольно малое ε , добавим число $i \cdot \varepsilon$ к элементу (i, i) для $i = 1, \dots, n$. Тогда собственными значениями станут n различных чисел $i \cdot \varepsilon$, поэтому жорданова форма изменится от $J_n(0)$ к $\text{diag}(\varepsilon, 2\varepsilon, \dots, n\varepsilon)$.

Вторая причина: в общем случае, жорданова форма не может быть вычислена устойчиво. Иначе говоря, для вычисленных S и J мы не можем гарантировать, что при некоторой малой матрице δA имеет место равенство $S^{-1}(A + \delta A)S = J$.

Пример 1.4. Предположим, что равенство $S^{-1}AS = J$ выполнено точно и матрица S обусловлена очень плохо (т.е. число $\kappa(S) = \|S\| \cdot \|S^{-1}\|$ очень велико). Пусть нам очень повезло и матрицу S удалось вычислить точно, а J — лишь с очень малой ошибкой δJ , так что $\|\delta J\| = O(\varepsilon)\|A\|$. Насколько велика может быть обратная ошибка? Другими словами, насколько велика может быть матрица δA , такая, что $S^{-1}(A + \delta A)S = J + \delta J$? Имеем $\delta A = S\delta JS^{-1}$, поэтому можно лишь сказать, что $\|\delta A\| \leq \|S\| \cdot \|\delta J\| \cdot \|S^{-1}\| = O(\varepsilon)\kappa(S)\|A\|$. Итак, $\|\delta A\|$ может быть много больше, чем $\varepsilon\|A\|$, что исключает свойство обратной устойчивости.

Вместо того чтобы работать с соотношением $S^{-1}AS = J$, где S может быть как угодно плохо обусловленной матрицей, для обеспечения устойчивости будем брать S из множества ортогональных матриц. При таком ограничении получим другую каноническую форму.

Теорема 1.4. (каноническая форма Шура). Для произвольной матрицы A найдутся унитарная матрица Q и верхнетреугольная матрица T , такие, что $Q^*AQ = T$. Собственными значениями матрицы A являются диагональные элементы матрицы T .

Заметим, что форма Шура не единственна, поскольку собственные значения могут располагаться на диагонали матрицы T в произвольном порядке.

Описанная процедура вводит комплексные числа даже тогда, когда матрица A вещественна. Однако для вещественной A предпочитаем каноническую форму, которая сама вещественна.

Следующий раздел работы посвящен изложению теории возмущений при вычислении собственных значений и собственных векторов несимметричной матрицы. Приводятся оценки влияния различных ошибок, которые присущи формулировке задачи и способам ее решения.

Теорема 2.1. Пусть λ — простое собственное значение матрицы A , а x и y — соответствующие правый и левый собственные векторы, нормированные так, что $\|x\|_2 = \|y\|_2 = 1$. Пусть $\lambda + \delta\lambda$ — соответствующее собственное значение матрицы $A + \delta A$. Тогда

$$\delta\lambda = \frac{y^* \delta A x}{y^* x} + O(\|\delta A\|_2).$$

Теорема 2.1 полезна лишь при достаточно малых $\|\delta A\|$, получим теорему, верную для возмущений $\|\delta A\|$ произвольной величины.

Теорема 2.2.(Гершгорина) Пусть B — произвольная матрица. Тогда все ее собственные значения принадлежат объединению n кругов

$$|\lambda - b_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |b_{ij}| (i = 1, \dots, n).$$

Теорема 2.3. Пусть все собственные значения матрицы A простые. Обозначим их через λ_i , и пусть x_i и y_i — соответствующие правые и левые собственные векторы, нормированные так, что $\|x_i\|_2 = \|y_i\|_2 = 1$. Тогда собственные значения матрицы $A + \delta A$ находятся в кругах B_i с центрами λ_i и радиусами $n \frac{\|\delta A\|_2}{|y_i^* x_i|}$.

Теорема 2.4. Пусть λ — простое собственное значение матрицы A . Пусть x и y — соответствующие нормированные собственные векторы, правый и левый, а $c = 1/|y^* x|$ есть число обусловленности λ . Тогда найдется возмущение δA такое, что λ является кратным собственным значением матрицы $A + \delta A$, причем

$$\frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2} \leq \frac{1}{\sqrt{c^2 - 1}}.$$

Замечание 2.1. Если $c \gg 1$, т. е. собственное значение плохо обусловлено, то эта верхняя граница для расстояния ведет себя как $1/\sqrt{c^2 - 1} \approx 1/c$, т. е. как величина, обратная числу обусловленности.

Теорема 2.5. Пусть диагонализуемая матрица A имеет собственные значения λ_i и соответствующие собственные векторы (правые и левые) x_i и y_i ; последние нормированы так, что $\|x_i\|_2 = \|y_i\|_2 = 1$. Пусть матрица S такова, что $S^{-1}AS = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$. Тогда $\|S\|_2 \cdot \|S^{-1}\|_2 \geq \max_i 1/|y_i^* x_i|$. Если положить $S = [x_1, \dots, x_n]$, то $\|S\|_2 \cdot \|S^{-1}\|_2 \leq n \cdot \max_i 1/|y_i^* x_i|$ т.е. число обусловленности такой матрицы S не более чем в n раз превышает минимальное возможное значение.

Теорема утверждает, что если какое-либо собственное значение имеет большое число обусловленности, то число обусловленности матрицы S должно быть примерно столь же большим. Иначе говоря, числа обусловленности

при вычислении (хуже всего обусловленного) собственного значения и приведении матрицы к диагональной форме приблизительно одинаковы.

Заключительная часть работы содержит алгоритмы для несимметричной проблемы собственных значений.

Алгоритм 3.1. Степенной метод: для заданного вектора x_0 выполнять итерации

$i = 0$

repeat

$$y_{i+1} = Ax_i$$

$$x_{i+1} = y_{i+1} / \|y_{i+1}\|_2 \quad (\text{приближенный собственный вектор})$$

$$\tilde{\lambda}_{i+1} = x_{i+1}^T Ax_{i+1} \quad (\text{приближенное собственное значение})$$

$$i = i + 1$$

пока метод не сойдется

Предположение $\xi_1 \neq 0$ с очень большой вероятностью выполняется при случайном выборе x_0 . Основными недостатками следует считать: сходимость только к собственному значению с наибольшим модулем и соответствующему собственному вектору; зависимость скорости этой сходимости от величины $|\lambda_2/\lambda_1|$, которая может быть близка к 1, что влечет за собой очень медленную сходимость. В действительности, если для вещественной матрицы A собственное значение с наибольшим модулем является комплексным, то имеется пара сопряженных комплексных собственных значений λ_1 и λ_2 с таким модулем: $|\lambda_1| = |\lambda_2|$. В этом случае проведенный выше анализ не работает вовсе. В предельной ситуации ортогональной матрицы все собственные значения имеют один и тот же модуль 1.

Применим степенной метод не к A , а к матрице $(A - \sigma I)^{-1}$, где число σ называется сдвигом. Это позволит нам получить сходимость не к λ_1 , а к собственному значению, ближайшему к σ . Такой метод называется обратной итерацией, или обращенным степенным методом.

Алгоритм 3.2. Обратная итерация: для заданного вектора x_0 выполнять итерации

$i = 0$

repeat

$$y_{i+1} = (A - \sigma I)^{-1} x_i$$

$$\begin{aligned}
x_{i+1} &= y_{i+1} / \|y_{i+1}\|_2 && \text{(приближенный собственный вектор)} \\
\tilde{\lambda}_{i+1} &= x_{i+1}^T A x_{i+1} && \text{(приближенное собственное значение)} \\
i &= i + 1
\end{aligned}$$

пока метод не сойдется

Преимущество обратной итерации по сравнению со степенным методом состоит в ее способности сходиться к любому собственному значению (тому, что ближе всех к сдвигу σ). Выбирая σ вблизи нужного собственного значения, можно добиться очень быстрой сходимости. Таким образом, в отличие от исходного степенного метода, здесь мы не ограничены возможной близостью других собственных значений. Метод особенно эффективен, когда уже имеется хорошее приближение к собственному значению и требуется лишь найти соответствующий собственный вектор.

Еще одно улучшение метода позволит нам получить одновременную сходимость к p -мерному инвариантному подпространству (где $p > 1$), а не только к отдельному собственному вектору. Оно называется ортогональной итерацией (а иногда также итерированием подпространства или одновременной итерацией).

Алгоритм 3.3. Ортогональная итерация: пусть Z_0 — матрица размера $n \times p$ с ортонормированными столбцами. Выполняются итерации

$$i = 0$$

repeat

$$Y_{i+1} = AZ_i$$

Вычислить разложение $Y_{i+1} = Z_{i+1}R_{i+1}$, используя алгоритм 1.1 (QR -разложение) (линейная оболочка столбцов матрицы Z_{i+1} дает приближенное инвариантное подпространство для A)

$$i = i + 1$$

пока метод не сойдется

Приводимая ниже теорема показывает, что при определенных предположениях с помощью ортогональной итерации можно вычислять форму Шура матрицы A .

Теорема 3.1. Пусть ортогональная итерация с $p = n$ и $Z_0 = I$ применяется к матрице A . Если все собственные значения матрицы имеют попарно различные модули и все главные подматрицы $S(1 : j, 1 : j)$ невырождены,

то матрицы $A_i \equiv Z_i^T A Z_i$ сходятся к верхней форме Шура матрицы A , т.е. к верхней треугольной матрице, на диагонали которой расположены собственные значения. Они упорядочены по убыванию абсолютных величин.

В действительности, из этого анализа видно, что подматрица $Z_{2i}^T A Z_{1i} = A_i(p+1:n, 1:p)$ должна сходиться к нулю со скоростью $|\lambda_{p+1}/\lambda_p|^i$. Поэтому λ_p будет предельным значением элемента (p, p) в A_i , а сходимость будет происходить со скоростью $\max(|\lambda_{p+1}/\lambda_p|^i, |\lambda_p/\lambda_{p-1}|^i)$.

Алгоритм 3.4. QR-итерация: для заданной матрицы A_0 выполнять итерации

$i = 0$

repeat

Вычислить разложение $A_i = Q_i R_i$ (QR-разложение)

$A_{i+1} = R_i Q_i$

$i = i + 1$

пока метод не сойдется

Поскольку $A_{i+1} = R_i Q_i = Q_i^T (Q_i R_i) Q_i = Q_i^T A_i Q_i$, матрицы A_{i+1} и A_i ортогонально подобны.

Утверждаем, что матрица A_i , вычисляемая в QR-итерации, совпадает с матрицей $Z_i^T A Z_i$, неявно вычисляемой в ортогональной итерации.

Из предыдущего анализа знаем, что скорость сходимости определяется отношениями собственных значений. Для ускорения сходимости применим сдвиги и обращение.

Алгоритм 3.5. QR-итерация со сдвигом: для заданной матрицы A_0 выполнять итерации

$i = 0$

repeat

Выбрать сдвиг σ_i вблизи некоторого собственного значения матрицы A

Вычислить разложение $A_i - \sigma_i I = Q_i R_i$ (QR-разложение)

$A_{i+1} = R_i Q_i + \sigma_i I$

$i = i + 1$

пока метод не сойдется

В работе показывается, что приведенный алгоритм имеет квадратичную сходимость.

Заключение. В данной бакалаврской работе подробно было рассмотрено QR-разложение матриц. Также были рассмотрены канонические формы матриц; которые нужны для нахождения собственных значений и собственных векторов. Изложена теория возмущений при вычислении собственных значений и собственных векторов несимметричной матрицы. В результате отыскали алгоритм с достаточно высокой скоростью сходимости, который способен устойчиво решать проблему нахождения собственных значений несимметричной матрицы.