

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|---|----|
| ВВЕДЕНИЕ | 2 |
| Тема 1 РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ (СЛАУ) | 3 |
| Лекция 1 Прямые методы решения СЛАУ | 3 |
| 1 Классификация методов решения алгебраических уравнений..... | 3 |
| 2 Методы последовательного исключения неизвестных | 4 |
| 3 Вычисление обратных матриц и определителей | 13 |
| 4 Сравнение методов | 14 |
| Лекция 2 Итерационные методы решения СЛАУ | 16 |
| 1 Метод простой итерации..... | 17 |
| 2 Метод Зейделя..... | 20 |
| 3 Каноническая форма итерационного процесса..... | 24 |
| 4 Вариационные методы | 26 |
| Тема 2 ВЫЧИСЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРОВ МАТРИЦЫ | 29 |
| Лекция 1 Вычисление собственных значений и собственных векторов матрицы | 29 |
| 1 Характеристический многочлен матрицы..... | 29 |
| 2 Метод Крылова..... | 31 |
| 3 Метод Данилевского..... | 35 |
| Лекция 2 Итерационные методы решения проблемы собственных значений..... | 39 |
| 1 Итерационный метод вращения | 39 |
| 2 Нахождение наибольшего по модулю собственного значения матрицы и соответствующего собственного вектора..... | 43 |
| 3 Определение второго собственного значения и второго собственного вектора | 47 |
| ЛИТЕРАТУРА..... | 51 |

ВВЕДЕНИЕ

Изучение курса «Методы вычислений» предусмотрено образовательным стандартом и учебным планом подготовки специалистов специальности 1-31 03 01-02 «Математика (научно-педагогическая деятельность)». Данная дисциплина входит в цикл общепрофессиональных и специальных дисциплин указанной специальности.

Характерной особенностью современного этапа образования и развития производства следует считать резкое повышение требований к квалификации работников производства, управления и образования. Содержание образовательного процесса в вузах достаточно жестко определяется государственными образовательными стандартами высшего профессионального образования, которые предусматривают выпуск конкурентно способных на рынке труда специалистов. Последние должны формировать у себя прочные теоретические и практические навыки самообразования, что возможно в современных условиях только при наличии должного уровня информационной культуры.

В курсе лекций рассматриваются вопросы решения систем алгебраических уравнений прямыми и итерационными методами и вычисления собственных значений и функций. Приводятся примеры, поясняющие теоретический материал.

Тексты лекций по курсу «Методы вычислений» направлены на формирование теоретической и практической углубленной подготовки студентов в области применения численных методов. Изучение курса базируется на дисциплинах: «Вычислительные методы алгебры», «Функциональный анализ и интегральные уравнения», «ЭВМ и программирование», «Программное обеспечение ЭВМ», «Математический анализ».

Курс лекций может быть использован преподавателями при проведении практических занятий и студентами в их самостоятельной работе над предметом.

Тема 1 РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ (СЛАУ)

Лекция 1 Прямые методы решения СЛАУ

- 1 Классификация методов решения алгебраических уравнений
- 2 Методы последовательного исключения неизвестных
- 3 Вычисление обратных матриц и определителей
- 4 Сравнение методов

1 Классификация методов решения алгебраических уравнений

К системам линейных алгебраических уравнений приводятся многие задачи численного анализа. Из курса высшей алгебры известно, что существуют различные способы решения линейных систем однако ещё и сейчас трудно указать способы, наиболее эффективные с точки зрения быстроты получения решения с достаточной степенью точности, а при использовании ЭВМ при требовании минимального объема памяти. Известное правило Крамера в этом смысле не выгодно, т.к. требует достаточно большого числа арифметических действий (порядка $n^2n!$ умножений и делений, где n – порядок системы). Следовательно для решения больших систем необходимо выбрать другой способ вычисления неизвестных и сделать его менее трудоемким.

Используемые практически методы решения систем линейных алгебраических уравнений подразделяют на **две** группы:

- 1) **точные методы**;
- 2) **итерационные методы** (методы последовательных приближений).

Точные методы характеризуются тем, что для любых систем позволяют найти точные значения неизвестных после конечного числа арифметических операций, каждая из которых выполняется точно.

Чаще всего эти методы реализуются в два этапа. На первом этапе преобразуют систему к одному из простых видов. На втором решают упрощенную систему и получают значения неизвестных.

Итерационные методы характеризуются тем, что точное решение получают в них в результате бесконечного процесса приближений.

Особое место среди них занимают вероятностные методы. Отметим, что классы задач, для решения которых обычно применяются методы вышеуказанных групп можно условно назвать классами задач с малым, средним, большим числом неизвестных.

В настоящее время, точные методы целесообразно применять, когда порядок системы $n \leq 10^3$ и итерационные, если $n \leq 10^6$.

2 Методы последовательного исключения неизвестных

Рассмотрим задачу решения систем уравнений

$$Ax = f,$$

где $A = [a_{ij}]$ - матрица размерности $m \times m$, $\det A \neq 0$,
 $f = (a_{1,m+1}, a_{2,m+1}, \dots, a_{m,m+1})^T$.

Метод решения задачи относится к классу точных, если в предположении отсутствия округления он дает точное решение задачи после конечного числа арифметических и логических операций. Для полностью заполненной матрицы системы при использовании точных методов требуемое число операций имеет порядок m^3 . Поэтому необходимо, чтобы такой порядок числа операций был приемлем для данной ЭВМ. Другие ограничения определяются структурой и объемом памяти ЭВМ. Наиболее известными из точных методов решения СЛАУ являются методы Гаусса.

2.1 Метод Гаусса с ведущим элементом

Рассмотрим схему исключения неизвестных с ведущим элементом. Полагая, что в системе уравнений $a_{11} \neq 0$, первое уравнение системы

$$\sum_{j=1}^m a_{1j} x_j = a_{1,m+1}, \quad i = \overline{1, m}, \quad (1.1)$$

делим на коэффициент a_{11} , в результате чего получаем уравнение

$$x_1 + \sum_{j=2}^m a_{1j}^{(1)} x_j = a_{1,m+1}^{(1)},$$

где $a_{ij}^{(1)} = \frac{a_{ij}}{a_{11}}$, $a_{i,m+1}^{(1)} = \frac{a_{i,m+1}}{a_{11}}$, $(i = 1)$.

$$x_m = a_{m,m+1}^{(m)}, \quad x_i = a_{i,m+1}^{(i)} - \sum_{j=i+1}^m a_{ij}^{(i)} x_j, \quad i = \overline{m-1, 1}.$$

Изложенный метод Гаусса можно применять в том случае, когда все главные миноры матрицы отличны от нуля.

2.2 Метод Гаусса с выбором главного элемента

Его отличие от описанного выше схемы метода Гаусса состоит в следующем. Пусть по ходу исключения неизвестных получена система уравнений:

$$x_i + \sum_{j=i+1}^m a_{ij}^{(i)} x_j = a_{i,m+1}^{(i)}, \quad i = \overline{1, k}$$

$$\sum_{j=k+1}^m a_{ij}^{(k)} x_j = a_{i,m+1}^{(k)}, \quad i = \overline{k+1, m}.$$

Найдем такое l , что

$$\left| a_{k+1,l}^{(k)} \right| = \max_j \left| a_{k+1,j}^{(k)} \right|.$$

Элемент с номером l в строке называется **главным элементом**, т.е. максимальным по модулю в строке. Далее переобозначим $x_{k+1} = x_l$, $x_l = x_{k+1}$. Далее произведем исключение неизвестной x_{k+1} из всех уравнений, начиная с $k+2$. Такое преобразование, приводит к изменению порядка исключения неизвестных и существенно уменьшает чувствительность решения к операциям округления при вычислениях.

2.3 Метод квадратного корня

Пусть дана система уравнений

$$Ax = f, \tag{1.3}$$

где $A = [a_{ij}]$ - матрица размерности $n * n$, $\det A \neq 0$, $x = (x_1, \dots, x_n)^T$, $f = (a_{1,n+1}, a_{2,n+1}, \dots, a_{n,n+1})^T$.

Метод квадратного корня и схема Халецкого основаны на разложении матрицы на произведение двух треугольных (нижних и верхних). Чтобы это разложение было единственным, исходная матрица

должна быть невырожденной, а на главных диагоналях треугольных матриц должны быть заданы условия на коэффициенты.

Известна следующая

Теорема 1.1. Всякую квадратную матрицу A , имеющую отличные от нуля главные диагональные миноры

$$\Delta_1 = a_{11} \neq 0, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \neq 0, \dots, \Delta_n = \det A \neq 0$$

можно представить в виде произведения двух треугольных матриц различных структур (нижней и верхней), причем это разложение будет единственным, если заранее зафиксировать диагональные элементы одной из треугольных матриц (например, положить их равными 1).

В методе квадратного корня считаем матрицу A эрмитовой, т.е. совпадающей со своей с комплексно сопряженной транспонированной матрицей $A^* = A(A - \text{симметричная})$. Представим матрицу A в виде:

$$A = S^* D S, \quad (1.4)$$

где S - верхняя треугольная матрица,

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ 0 & S_{22} & S_{23} \\ 0 & 0 & S_{33} \end{pmatrix},$$

$S^* = (\bar{s}_{ji})$ - сопряженная к ней, D - диагональная матрица:

$$D = \text{diag}(d_{11}, d_{22}, \dots, d_{nn}).$$

Чтобы получить разложение (1.4), обозначим $S = (s_{ij})$, $D = (d_{ii} \delta_{ij})$. Таким образом, чтобы найти элементы матриц D и S в (1.4), нужно перемножить матрицы S^* , D и S , и приравнять соответствующие элементы матриц A и $S^* D S$. Учитывая сказанное, имеем

$$(DS)_{ij} = \sum_{k=1}^n d_{ik} s_{kj} = d_{ii} s_{ij}, \quad (S^* DS)_{ij} = \sum_{k=1}^n \bar{s}_{ki} d_{kk} s_{kj},$$

где черта означает комплексное сопряжение. Равенство (1.4) теперь принимает вид:

$$\sum_{k=1}^n \bar{s}_{ki} d_{kk} s_{kj} = a_{ij}. \quad (1.5)$$

Эту систему уравнений можно решать рекуррентно. Так как S - верхняя треугольная матрица, то $s_{ki} = 0$, при $k > i$ и $\bar{s}_{ik} = 0$, при $k < i$. Следовательно

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n \bar{s}_{ki} d_{kk} s_{kj} &= \sum_{k=1}^{i-1} \bar{s}_{ki} s_{kj} d_{kk} + \bar{s}_{ii} s_{ij} d_{ii} + \sum_{k=i+1}^n \bar{s}_{ki} s_{kj} d_{kk} = \\ &= \sum_{k=1}^{i-1} \bar{s}_{ki} s_{kj} d_{kk} + \bar{s}_{ii} s_{ij} d_{ii} = a_{ij} \end{aligned}$$

Так как матрица A эрмитова, то достаточно произвести сравнение элементов, стоящих на главной диагонали и справа от нее.

При $i = j$ имеем

$$|s_{ii}|^2 d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} |s_{ki}|^2 d_{kk}.$$

Выбирая

$$d_{ii} = \text{sign}(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} |s_{ki}|^2 d_{kk}), \quad (1.6)$$

находим

$$s_{ii} = \sqrt{\left| a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} |s_{ki}|^2 d_{kk} \right|}. \quad (1.7)$$

При $i < j$ получаем

$$s_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \bar{s}_{ki} s_{kj} d_{kk}}{\bar{s}_{ii} d_{ii}}. \quad (1.8)$$

Если матрица A - вещественная и ее главные миноры положительны, то $D \equiv E$ (единичная матрица) и формулы (1.6) – (1.8) записываются в виде:

$$\begin{aligned} s_{11} &= \sqrt{a_{11}}, \quad s_{1j} = \frac{a_{1j}}{s_{11}}, \quad s_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} s_{kj}^2}, \quad j = 2, 3, \dots, n, \\ s_{ij} &= \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} s_{ki} s_{kj}}{s_{ii}}, \quad i < j. \end{aligned}$$

Нужно заметить, что при действительных a_{ij} могут получиться чисто мнимые значения s_{ij} . Но, так как вычисления с чисто мнимыми значениями нисколько не труднее, чем с действительными, то это не вызовет дополнительных трудностей. Если, кроме того, матрица A положительно определенная, то мнимых величин вообще не будет.

Итак, формулы (1.6) – (1.8) дают возможность находить элементы матриц S^* , D и S . Теперь решение уравнения (1.3) сводится к последовательному решению двух треугольных систем

$$S^* D y = f \text{ и } S x = y. \quad (1.9)$$

Решая их, получаем

$$y_1 = \frac{f_1}{s_{11} d_{11}}, \quad y_k = \frac{f_k - \sum_{i=1}^{k-1} \bar{s}_{ik} y_i d_{ii}}{s_{kk} d_{kk}}, \quad k = \overline{2, n} \quad (1.10)$$

и

$$x_n = \frac{y_n}{s_{nn}}, \quad x_k = \frac{y_k - \sum_{i=k+1}^n s_{ki} x_i}{s_{kk}}, \quad k = \overline{n-1, 1}. \quad (1.11)$$

Замечание: Если полученное первое решение исходной системы x^1 сильно искажено погрешностью при вычислении, то поступают следующим образом. Определим вектор $f^1 = f - Ax^1$. Очевидно, что погрешность $r^1 = x - x^1$ удовлетворяет системе уравнений

$$Ar^1 = Ax - Ax^1 = f^1. \quad (1.12)$$

Решим систему $Ar^1 = f^1$ в условиях реальных округлений, получаем приближение $r^{(1)}$ к r^1 и следовательно $x^2 = x^1 + r^{(1)}$. Если точность нового приближения не удовлетворительная, то повторяют эту операцию. Поскольку погрешности округлений обычно малы, то $\|f^1\| \ll \|f\|$, тогда $\|r^1\| \ll \|x^1\|$ и, по-видимому, решение последней системы определяется существенно меньшей абсолютной погрешностью, чем решение системы (1.3).

Таким образом, применение описанного приема приводит к повышенной точности приближенных решений точных методов.

2.4 Схема Халецкого

Пусть дана система уравнений (1.3). Представим матрицу A в виде произведения двух треугольных матриц

$$A = BC, \quad (1.13)$$

где $B = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & \dots & 0 \\ b_{21} & b_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} \end{bmatrix}$ - нижняя треугольная матрица, а

$C = \begin{bmatrix} 1 & c_{12} & c_{13} & \dots & c_{1n} \\ 0 & 1 & c_{23} & \dots & c_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$ - верхняя треугольная матрица с

единичной диагональю.

Для определения коэффициентов матриц B и C достаточно перемножить их в буквенном виде, а результат произведения поэлементно сравнивать с элементами матрицы A . Тогда элементы b_{ij} и c_{ij} определяются по формулам:

$$\begin{cases} b_{i1} = a_{i1} \\ b_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik}c_{kj} \end{cases} \quad i \geq j \geq 1 \quad (1.14)$$

и

$$\begin{cases} c_{1j} = \frac{a_{1j}}{b_{11}} \\ c_{ij} = \frac{1}{b_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik}c_{kj} \right) \end{cases}, \quad 1 < i < j. \quad (1.15)$$

Отсюда искомый вектор x можно вычислить из матричных уравнений

$$By = f \quad \text{и} \quad Cx = y. \quad (1.16)$$

Так как $Ax = B\underbrace{Cx}_y = f$, и матрицы B и C являются треугольными, то системы из (1.16) легко решаются. Сначала надо определить значение вспомогательного вектора y :

$$\begin{cases} y_1 = \frac{a_{1,n+1}}{b_{11}} \\ y_i = \frac{1}{b_{ii}}(a_{i,n+1} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik} y_k), \quad i > 1 \end{cases} . \quad (1.17)$$

Затем находим x_i как и в методе Гаусса обратным ходом:

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^n c_{ik} x_k, \quad i < n \end{cases} . \quad (1.18)$$

Этот метод получил название схемы Халецкого. Очевидно, что в схеме Халецкого компоненты вектора y_i удобно вычислять вместе с коэффициентами c_{ij} .

Схема Халецкого отличается от компактной схемы Гаусса лишь тем, что в схеме Гаусса в матрице B на главной диагонали ставятся 1, а в матрице C элементы c_{ij} . Отметим, что если матрица A симметрична (то есть $a_{ij} = a_{ji}$), то коэффициент c_{ij} определяется

$$\text{как: } c_{ij} = \frac{b_{ij}}{b_{ii}}, \quad i < j.$$

2.5 Метод прогонки

Пусть дана система

$$Ax = f \quad (1.19)$$

с трёхдиагональной матрицей A

$$A = \begin{bmatrix} B_0 & C_0 & \\ A_1 & B_1 & C_1 \\ \dots & \dots & \dots \\ & A_n & B_n \end{bmatrix}.$$

Тогда систему уравнений (1.19) можно представить в виде:

$$\begin{cases} B_0 x_0 + C_0 x_1 = f_0 \\ A_i x_{i-1} + B_i x_i + C_i x_{i+1} = f_i \quad (i = \overline{1, n-1}) \\ A_n x_{n-1} + B_n x_n = f_n \end{cases} \quad (1.20)$$

Значение вектора x_i определяется из рекуррентных соотношений

$$x_i = \alpha_i x_{i+1} + \beta_i, \quad (1.21)$$

тогда

$$x_{i-1} = \alpha_{i-1} x_i + \beta_{i-1}, \quad (1.22)$$

здесь α_i и β_i - прогоночные коэффициенты.

Подставим (1.21) и (1.22) в среднее уравнение (1.20) и выполним преобразование:

$$(A_i \alpha_{i-1} \alpha_i + B_i \alpha_i + C_i) x_{i+1} + A_i \alpha_{i-1} \beta_i + A_i \beta_{i-1} + B_i \beta_i = f_i, (i = \overline{0, n}).$$

Для того чтобы это равенство превратилось в тождество для любого ненулевого вектора x_{i+1} достаточно выражение в скобках приравнять к нулю.

$$\alpha_i = \frac{C_i}{(B_i + A_i \alpha_{i-1})}, \quad (1.23)$$

$$\beta_i = -\frac{A_i \beta_{i-1} - f_i}{(B_i + A_i \alpha_{i-1})}. \quad (1.24)$$

Учитывая первое равенство системы (1.20) из формул (1.23) и (1.24) можем получить:

$$A_0 = 0 \Rightarrow \alpha_0 = -\frac{C_0}{B_0}, \beta_0 = \frac{f_0}{B_0}.$$

Выполняя **прямую прогонку**, определим по формулам (1.23) и (1.24) все α_i и β_i , учитывая, что $C_n = 0$ получаем $\alpha_n = 0$ и, следовательно, из (1.20), что $x_n = \beta_n$.

Обратной прогонкой по формуле (1.21), при $i = n, n-1, \dots, 1$, определим последовательность $x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0$.

Метод прогонки хорошо обусловлен, если выполняется условие, что

$$|A_i| \geq |C_i|, |B_i| \geq |A_i| + |C_i|. \quad (1.25)$$

В этом случае метод монотонной прогонки, рассмотренный нами, всегда даст единственное решение, так как в этом случае $|\alpha_i| < 1$ для $i = \overline{0, n}$ и, следовательно, погрешность прогоночных коэффициентов не будет возрастать при прямом ходе и очевидно, что при обратном ходе погрешность округления будет расти меньше. Если условие (1.25) не выполняется, то следует использовать немонотонную прогонку, которая является методом Гаусса с выбором главных элементов для трёхдиагональных матриц.

3 Вычисление обратных матриц и определителей

По определению обратная матрица A^{-1} к матрице A будет, если исходную матрицу умножить слева или справа на обратную, получим единичную матрицу, т.е. $A^{-1}A = AA^{-1} = E$. Для получения обратной матрицы по схемам Гаусса следует решать систему уравнений с n правыми частями, правая часть которой является единичной матрицей, или n раз решить эту систему, правой частью, которая является столбцами единичной матрицы.

Следовательно, если $A = [a_{ij}]$, $A^{-1} = [x_{ij}]$, то решаем систему $AA^{-1} = E$ или

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

В результате решения этой системы получим столбцы матрицы A^{-1} , элементы которой x_{ij} будут элементами **обратной** матрицы.

Вычислить **определитель** можно, используя известные прямые методы. В **методе Гаусса**, после выполнения прямого хода определитель равен произведению диагональных элементов $a_{11}, a_{ii}^{(k)}$ преобразованной матрицы A по схеме Гаусса:

$$\det A = a_{11} a_{22}^{(1)} a_{33}^{(2)} \dots a_{nn}^{(n-1)}.$$

По **схеме Халецкого**, т.к. $A = BC$, то $\det A = \det B * \det C$, $\det B = b_{11} b_{22} \dots b_{nn}$, $\det C = 1$, $\det A = b_{11} b_{22} \dots b_{nn}$ - произведение диагональных элементов матрицы B .

В методе **квадратного корня** определитель равен квадрату диагональных элементов матрицы S , а $\det D$ даёт значение + или - 1. Для положительно определенной матрицы $\det D = 1$ и $A = S * DS$,

$$\det A = \det S * \det D \det S = S_{11}^2 S_{22}^2 \dots S_{nn}^2 \det D.$$

Всё сказанное следует из того, что определитель треугольной матрицы равен произведению её диагональных элементов. Если $A = BC$, то $A^{-1} = C^{-1} B^{-1}$, так как в этом случае получим:

$$A^{-1} A = C^{-1} \underbrace{B^{-1} B}_E C = E.$$

4 Сравнение методов

Выбор в каждом отдельном случае конкретного метода решения системы линейных алгебраических уравнений определяется многими факторами:

- особенностями матрицы коэффициентов системы;
- порядком системы;
- сложностью алгоритма;
- быстродействием;
- объемом памяти ЭВМ и т.п.

Метод Гаусса является одним из наиболее универсальных и эффективных при решении СЛАУ. Применение его особенно целесообразно для линейных систем общего вида с плотно заполненной матрицей коэффициентов. Реализация метода требует около n^2 ячеек оперативной памяти, что ограничивает порядок решаемой с его помощью системы ($n < 10^4$). Число арифметических операций, выполняемых при решении методом Гаусса системы уравнений порядка n , в общем случае составляет примерно $2n^3/2$.

При решении систем уравнений высокого порядка ($n > 10^4$) с разреженной матрицей коэффициентов наиболее эффективно применение итерационных методов. У разреженных матриц большинство элементов равно нулю. В памяти ЭВМ хранятся только ненулевые элементы таких матриц либо эти элементы вычисляются по мере необходимости по определенным выражениям. Метод Зейделя в отличие от метода Гаусса использует особенности разреженных матриц, поэтому он требует выполнения меньшего количества операций (около n^2), а соответственно и меньших затрат машинного времени. Кроме того, ошибки округления в итерационных методах сказываются существенно меньше, чем в прямых. Метод Зейделя является самоисправляющимся, т.е. отдельная ошибка, допущенная при вычислениях, не отражается на конечном результате, так как ошибочное приближение рассматривается как новый начальный вектор. Важным преимуществом итерационных методов является удобство их программной реализации, так как они требуют выполнения однообразных повторяющихся операций.

Вопросы для самоконтроля

- 1 В чем заключается отличие прямых методов от итерационных?
- 2 Смысл метода Гаусса с ведущим элементом.
- 3 Смысл метода Гаусса с выбором главного элемента.
- 4 В заключается метод квадратного корня?
- 5 Каков смысл метода Халецкого?
- 6 Структура метода прогонки.
- 7 Зачем нужен обратный ход в методе прогонки?
- 8 Как вычислить обратную матрицу приведенными методами?
- 9 Как вычислить определитель приведенными методами?

Лекция 2 Итерационные методы решения СЛАУ

- 1 Метод простой итерации
- 2 Метод Зейделя
- 3 Каноническая форма итерационного процесса
- 4 Вариационные методы

Итерационные методы дают возможность найти решение системы как предел бесконечного вычислительного процесса, позволяющего по уже найденным приближениям к решению построить следующее приближение. Так как приближенное решение является вектором или матрицей, то итерационный процесс следует рассматривать как предел последовательности векторов.

Пусть в n -мерном векторном пространстве дана последовательность векторов: $x^k = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k)$ ($k = 1, 2, \dots$).

Вектор $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ называется пределом этой последовательности, если существует каждый из n указанных пределов:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^k = x_i, \quad i = \overline{1, n}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Аналогично, если дана последовательность квадратичных матриц $A_k = [a_{ij}^k]$, ($k = 1, 2, \dots$), то матрицу $A = [a_{ij}]$ – называют пределом этой последовательности, если существует n^2 пределов $\lim_{k \rightarrow \infty} a_{ij}^k = a_{ij}$, $i, j = \overline{1, n}$, $k = 1, 2, \dots$.

Говорят, что последовательность векторов x^k сходится к вектору x по норме, если норма $\|x - x_k\| \rightarrow 0$.

Особенностью итерационных методов является их самоисправляемость и простота реализация на ЭВМ. Если в точном методе ошибка в вычислении ведет к ошибке в результате, то, в случае сходящегося итерационного процесса, ошибка в каком-то приближении исправляется в последующих вычислениях. Для такого исправления требуется, как правило, только выполнение нескольких единообразных шагов в вычислении.

Сказанное относительно точных методов справедливо, если вычислительная ошибка ничем не компенсируется. Чтобы начать итера-

ционный процесс надо знать одно или несколько начальных приближений к решению.

Условие сходимости и скорость сходимости каждого итерационного метода (процесса) существенно зависит от свойств системы уравнений, т.е. от свойств матрицы системы и от выбора начальных приближений.

1 Метод простой итерации

Пусть дана система линейных алгебраических уравнений:

$$Ax = f \quad (2.1)$$

с неособенной матрицей A .

В методе простой итерации необходимо исходную систему предварительно привести к каноническому виду

$$x = Bx + b. \quad (2.2)$$

Представим матрицу A в виде: $A = C + D$. Тогда $(C + D)x = f$ или $x = -C^{-1}Dx + C^{-1}f$, тогда $B = -C^{-1}D$, $b = C^{-1}f$, $\det C \neq 0$.

Для матрицы A с диагональным преобладанием в качестве матрицы C следует взять матрицу из диагональных элементов $[a_{ii}]$, т.е. $C = [a_{ii}]$. В этом случае, очевидно, что $\|B\| < 1$.

Пусть известно начальное приближение: $x^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$ к точному решению $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. Все следующие приближения определим следующим образом:

$$x^{k+1} = Bx^k + b, \quad (k=1, 2, \dots). \quad (2.3)$$

Если последовательность приближений сходится к некоторому предельному вектору x^* , то он будет решением системы. Действительно, если в равенстве (2.3) перейти к пределу при $k \rightarrow \infty$, считая, что $x^k \rightarrow x^*$, то в пределе получим $x^* = Bx^* + b$.

1.1 Условие сходимости метода простой итерации

Для выяснения условия сходимости последовательности (x^k) докажем ряд теорем.

Теорема 2.1:

Для того, что бы последовательность приближений x^k сходилась, достаточно чтобы все собственные значения матрицы B , были по модулю меньше единицы,

$$|\lambda_i| < 1, \quad i = \overline{1, n}. \quad (2.4)$$

Доказательство: Найдем выражение любого приближения x^k через значение x^0 :

$$\begin{aligned} x^k &= Bx^{k-1} + b = B[Bx^{k-2} + b] + b = B^2x^{k-2} + (E + B)b = \\ &\dots = B^kx^0 + (E + B + B^2 + \dots + B^{k-1})b \end{aligned}$$

Тогда, учитывая (2.4) и определение, что при $|\lambda_i| < 1 \quad (i = \overline{1, n})$ справедливо равенство:

$$E + A + A^2 + \dots + A^m = (E - A)^{-1},$$

сразу следует, что при $k \rightarrow \infty, B^k \rightarrow 0$ и

$$(E + B + B^2 + \dots + B^{k-1}) \rightarrow (E - B^{-1}),$$

откуда $x^k \rightarrow (E - B^{-1})b = x$. Ч.т.д.

Теорема 2.2:

Если требовать, чтобы последовательность x^k сходилась к x^* , при любом начальном векторе x^0 , то условие (2.4) является и необходимым.

Доказательство: Пусть для всякого начального приближения x^0 будет $x^k \rightarrow x^*$. Тогда имеем

$$x^* - x^k = (Bx^* + b) - (Bx^{k-1} + b) = B(x^* - x^{k-1}) = \dots = B^k(x^* - x^0).$$

При $k \rightarrow \infty$ разность $(x^* - x^k) \rightarrow 0$, поэтому последний член в цепи этих равенств должен стремиться к нулю, каким бы ни был вектор $(x^* - x^0)$. Откуда следует, что $B^k \rightarrow 0$. Последнее будет верно тогда, когда верно условие (2.4). Ч.т.д.

Применение теорем 2.1 и 2.2 возможно при известных собственных значениях матрицы или, по крайней мере, их границ. Определение собственных значений матрицы B часто является непростой задачей и требует большого числа арифметических операций.

Рассмотрим более простые, но **достаточные** признаки сходимости.

Теорема 2.3:

Для того, чтобы последовательность приближений x^k в методе простой итерации сходилась, достаточно, чтобы какая-либо норма матрицы B была меньше единицы.

Доказательство: Если $\|B\| < 1$, то согласно лемме о том, что модули собственных значений матрицы не превосходят любой из ее норм, т.е. $|\lambda_i| < \|B\|$ и $\|B\| < 1$, следует, что все собственные значения матрицы B по модулю меньше единицы и согласно теореме 2.1, последовательность (x^k) сходится. Ч.т.д.

Непосредственным следствием теоремы 2.3 и равенств, определяющих норму матриц, является следующая теорема.

Теорема 2.4:

Последовательность x^k в методе простой итерации сходится, если для матрицы B выполняется одно из неравенств:

$$1) \|B\|_1 = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |b_{ij}| < 1$$

$$2) \|B\|_2 = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |b_{ij}| < 1$$

$$3) \|B\|_3 = \sqrt{\sum_{i,j=1}^n |b_{ij}|^2} < 1.$$

В большинстве случаев важно знать с какой скоростью x^k сходилась к x^* и оценить погрешность $x^* - x^k$ замены точного решения системы x^* приближением x^k .

Теорема 2.5:

Если какая – либо норма матрицы B , согласованная с рассмотренной нормой вектора x , меньше единицы, то верна следующая оценка погрешности приближения в методе простой итерации:

$$\|x^* - x^k\| \leq \|B\|^k \|x^0\| + \frac{1}{1 - \|B\|} \|B\|^k \|b\|. \quad (2.5)$$

Доказательство:

Согласно теореме 2.1, для x^k можно записать

$$x^k = B^k x^0 + (E + B + B^2 + \dots + B^{k-1})b.$$

Так как $\|B\| < 1$, то $x^* = (E + B + B^2 + \dots)b$. Поэтому

$$x^* - x^k = (B^k + B^{k+1} + \dots)b - B^k x^0 \quad (2.6)$$

и норма

$$\|x^* - x^k\| \leq (\|B\|^k + \|B\|^{k+1} + \dots)\|b\| + \|B\|^k \|x^0\| = \|B\|^k \|x^0\| + \frac{\|B\|^k \|b\|}{1 - \|B\|}$$

Часто за x^0 принимают вектор b . В этом случае оценка (2.5) упрощается. Подставим в (2.6) $x^0 = b$, следовательно, получим

$$\|x^* - x^k\| \leq \frac{1}{1 - \|B\|} \|B\|^{k+1} \|b\| \quad (2.7)$$

Ч.т.д.

Замечание: Если задана точность $\varepsilon > 0$, то используя оценку (2.7)

$$\frac{\|B\|^{k+1}}{1 - \|B\|} \|b\| \leq \varepsilon, \text{ можно определить необходимое число итерации } k \text{ для}$$

получения требуемой точности. Здесь за x^0 принимается вектор b .

2 Метод Зейделя

Пусть дана система алгебраических уравнений $Ax = f$ с неособенной матрицей A .

Рассмотрим сначала случай канонической формы системы для метода простой итерации

$$x = Bx + b. \quad (2.8)$$

В методе простой итерации следующее приближение $x^{k+1} = (x_1^{k+1} \dots x_n^{k+1})$ находится по предыдущему $x^k = (x_1^k \dots x_n^k)$ подстановкой x^k в правую часть всех уравнений системы (2.8).

Результат подстановки записывается в развернутом виде:

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = b_{11}x_1^k + b_{12}x_2^k + b_{13}x_3^k + \dots + b_{1n}x_n^k + \beta_1 \\ x_2^{k+1} = b_{21}x_1^k + b_{22}x_2^k + b_{23}x_3^k + \dots + b_{2n}x_n^k + \beta_2 \\ \dots \\ x_n^{k+1} = b_{n1}x_1^k + b_{n2}x_2^k + \dots + b_{nn}x_n^k + \beta_n \end{cases} \quad (2.9)$$

В этом случае **опускаются две возможности улучшения итераций**:

1. разумный выбор порядка уравнений для подстановок;
2. немедленный ввод в вычисления каждого из полученных исправленных значений неизвестных.

Изменяя, если необходимо, нумерацию уравнений и неизвестных будем считать, что уравнения для подстановки берутся в порядке роста их номеров. Для каждого шага приближения порядок для уравнений подстановки может быть своим, т.е. перестановки уравнений и неизвестные свои. Следовательно, матрица B и свободные члены β_i будут иметь соответствующие изменения. Учитывая этот факт выбора порядка привлечения уравнений для подстановок, можем записать итерацию в методе Зейделя в следующем виде:

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = b_{11}x_1^k + b_{12}x_2^k + \dots + b_{1n}x_n^k + \beta_1 \\ x_2^{k+1} = b_{21}x_1^{k+1} + b_{22}x_2^k + b_{23}x_3^k + \dots + b_{2n}x_n^k + \beta_2 \\ x_3^{k+1} = b_{31}x_1^{k+1} + b_{32}x_2^{k+1} + b_{33}x_3^k + \dots + b_{3n}x_n^k + \beta_3 \\ \dots \\ x_n^{k+1} = b_{n1}x_1^{k+1} + b_{n2}x_2^{k+1} + b_{n3}x_3^{k+1} + \dots + b_{n,n-1}x_{n-1}^{k+1} + b_{nn}x_n^k + \beta_n \end{cases} \quad (2.10)$$

После определения вектора x^{k+1} , устанавливаем порядок, подстановок в уравнения значений x_i^{k+1} ($i = \overline{1, n}$) и переходим к вычислению вектора x^{k+2} и т. д.

Порядок выбора уравнения для подстановок можно построить исходя из принципа максимальной погрешности ε^k . Т.е в первую оче-

редь получаем ту составляющую решения, которая найдена менее точно, чтобы при нахождении решения других составляющих подставлять ее в улучшенное значение. Порядок выбора уравнений можно построить, используя невязки, полученные при подстановке неизвестных в уравнения и вычитания этих уравнений из правой части, т.е. $(f - Ax) = \delta$ - невязка. Следовательно, нумерацию уравнений системы проводят в порядке убывания невязок.

Обычно используется стационарный метод Зейделя, когда при итерациях порядок уравнений и неизвестных не меняется. В этом случае матрица B остается постоянной на всех шагах, а составляющая всех приближений определяется по значениям x_i^k , в соответствии с записанной системой (2.10).

Разложим матрицу B на сумму матриц D и C :

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_{21} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ b_{31} & b_{32} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ b_{n1} & b_{n2} & b_{n3} & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & \dots & b_{1n} \\ 0 & b_{22} & b_{23} & \dots & b_{2n} \\ 0 & 0 & b_{33} & \dots & b_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b_{nn} \end{pmatrix}.$$

Тогда равенство (2.9) можно записать в форме матричного равенства:

$$x^{k+1} = Dx^{k+1} + Cx^k + b$$

Откуда следует, что $(E - D)x^{k+1} = Cx^k + b$.

Так как

$$\det(E - D) = \det \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ -b_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ -b_{n1} & -b_{n2} & \dots & 1 \end{pmatrix} = 1$$

то матрица $E - D$ имеет обратную матрицу. Тогда равенство (2.10) равносильно

$$x^{k+1} = (E - D)^{-1}Cx^k + (E - D)^{-1}b. \quad (2.11)$$

Следовательно, стационарный метод Зейделя равносильен методу простой итерации, примененному к системе

$$x = (E - D)^{-1}Cx + (E - D)^{-1}b.$$

Отсюда для сходимости стационарного процесса Зейделя (2.9) при любом векторе x^0 начального приближения необходимо и достаточно, чтобы все собственные значения матрицы $(E - D)^{-1}C$ были по модулю меньше единицы. Т.е. корни уравнения $|(E - D)^{-1}C - \lambda E| = 0$ должны быть меньше единицы. Если учесть, что $|(E - D)^{-1}| = |E - D|^{-1} = 1$, то можно написать следующие соотношения:

$$\begin{aligned} |(E - D)^{-1}C - \lambda E| &= |(E - D)^{-1}[C - \lambda(E - D)]| = \\ &= |(E - D)^{-1}[C + \lambda D - \lambda E]| = |C + \lambda D - \lambda E| \end{aligned}$$

Тогда верна теорема.

Теорема 2.6:

Для того, чтобы стационарный метод Зейделя сходиллся при любом начальном векторе приближения x^0 необходимо и достаточно, чтобы все корни уравнения

$$|C + \lambda D - \lambda E| = \begin{vmatrix} b_{11} - \lambda & b_{21} & \dots & b_{1n} \\ b_{21}\lambda & b_{22} - \lambda & \dots & b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{n1}\lambda & b_{n2}\lambda & \dots & b_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (2.12)$$

были по модулю меньше единицы.

Лемма 2.1:

Если в матрице $A = [a_{ij}]$, $(i, j = \overline{1, n})$, диагональные элементы a_{ii} $(i = \overline{1, n})$ доминируют по строкам или столбцам, т.е. если $\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| < |a_{ii}|$, $(i = \overline{1, n})$ или

$\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}| < |a_{ii}|, \quad (j = \overline{1, n})$, то определитель матрицы A отличен от нуля.

Теорема 2:

Для сходимости стационарного метода Зейделя (2.11) достаточно, чтобы выполнялось хотя бы одно из условий

$$\|B\|_1 = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |b_{ij}| < 1 \quad (2.13)$$

$$\|B\|_2 = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |b_{ij}| < 1. \quad (2.14)$$

Для доказательства достаточно показать, что при выполнении условий (2.13), (2.14) все корни уравнения (2.12) по модулю будут меньше единицы.

3 Каноническая форма итерационного процесса

Пусть дана система линейных алгебраических уравнений:

$$Ax = f. \quad (2.15)$$

Для ее решения выбирают начальное приближение x_0 и последовательно находят приближенное решение уравнения (2.15). Значение итерации x_{k+1} выражается через известные предыдущие итерации x_k, x_{k-1}, \dots , если при вычислении x_{k+1} используется только **одна** предыдущая итерация x_k , то итерационный метод называется **одношаговым или двухслойным** методом. Если же x_{k+1} выражается через **две** итерации x_k и x_{k-1} , то метод называется **двухшаговым** (или трехслойным).

Будем считать, что A - линейный оператор в конечном пространстве H со скалярным произведением. Любой **двухслойный** итерационный метод можно записать в следующей **канонической** форме:

$$B \frac{x_{k+1} - x_k}{\tau_{k+1}} + Ax_k = f, \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.16)$$

для всех $x_0 \in H$, где A - оператор уравнения (2.15), B -линейный оператор, имеющий обратный оператор B^{-1} , k -номер итерации, $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{k+1}$ - итерационные параметры, $\tau_{k+1} > 0$. Оператор B может зависеть от номера k . Будем предполагать, что B не зависит от k . Если $B = E$ - единичный оператор, то итерационный метод

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau_{k+1}} + Ax_k = f, \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.17)$$

для всех $x_0 \in H$ называется **явным**: x_{k+1} находится по явной формуле $x_{k+1} = x_k - \tau_{k+1}(Ax_k - f)$. В общем случае, при $B \neq E$ - метод (2.16) называется **неявным** итерационным методом. Для определения x_{k+1} надо решить уравнение

$$Bx_{k+1} = Bx_k - \tau_{k+1}(Ax_k - f) = F_k \quad (k = 0, 1, 2, \dots). \quad (2.18)$$

Очевидно, необходимо требовать, чтобы объем вычислений для нахождения решения $Bx_{k+1} = F_k$ был меньше, чем объем вычислений для прямого решения системы (2.15).

Точность итерационного метода (2.16) характеризуется величиной погрешности $z_k = x_k - x$, то есть разностью между решением уравнения (2.16) и точным решением x исходной системы линейных алгебраических уравнений (2.15). Подставим $x_k = z_k + x$ в (2.16), придем к однородному уравнению для погрешности:

$$B \frac{z_{k+1} - z_k}{\tau_{k+1}} + Az_k = 0, \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad z_0 = x_0 - x \in H. \quad (2.19)$$

Говорят, что итерационный процесс (метод) сходится в H_D , если $\lim_{k \rightarrow \infty} \|z_k\|_D = 0$, где $\|z\|_D = \sqrt{(Dz, z)}$, $D = D^* > 0$, D - положительно определенный оператор $D: H \rightarrow H$.

Обычно задается некоторая относительная погрешность $\varepsilon > 0$, с которой надо найти приближенное решение x_k и прекращают вычисления как только выполнится условие:

$$\|x_k - x_{k-1}\|_D \leq \varepsilon \|x_0 - x\|_D. \quad (2.20)$$

Если $n = n(\varepsilon)$ - наименьшее из чисел для которых (2.20) выполняется, то общее число арифметических действий, которое затрачивается для нахождения приближенного решения уравнения (2.15); $Q_n(\varepsilon) = n(\varepsilon)q$, где q - число действий, затраченных для нахождения одной итерации, то есть решения уравнения (2.18). Задача состоит в минимизации $Q_n(\varepsilon)$ путем выбора оператора B и параметров $\{\tau_{k+1}\}$.

4 Вариационные методы

4.1 Метод минимальных невязок

Пусть дана система уравнений $Ax = f$. Запишем итерационный процесс в канонической форме:

$$B \frac{x_{k+1} - x_k}{\tau_{k+1}} + Ax_k = f, \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

для всех $x_0 \in H$. Будем считать, что оператор $A = A^* > 0$. Рассмотрим уравнение, когда $B = E$. В результате придем к явной схеме

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau_{k+1}} + Ax_k = f, \quad (k = 0, 1, 2, \dots). \quad (2.21)$$

Назовем величину $r_k = Ax_k - f$ - **невязкой**. Тогда для невязки r_k имеем уравнение

$$\frac{r_{k+1} - r_k}{\tau_{k+1}} + Ar_k = 0, \quad (k = 0, 1, 2, \dots), \quad r_0 = Ax_0 - f. \quad (2.22)$$

Параметр τ_{k+1} будем выбирать из условия минимума невязки r_{k+1} по норме:

$$\begin{aligned} \|r_{k+1}\|^2 &= \|r_k - \tau_{k+1}Ar_k\|^2 = \\ &= \|r_k\|^2 - 2\tau_{k+1}(Ar_k, r_k) + \tau_{k+1}^2 \|Ar_k\|^2 = \varphi(\tau_{k+1}) \end{aligned}$$

Продифференцируем это выражение по (τ_{k+1}) и приравняем к нулю $\varphi'(\tau_{k+1})$

$$\varphi'(\tau_{k+1}) = -2\tau_{k+1}(r_k, Ar_k) + 2\tau_{k+1} \|Ar_k\|^2 = 0$$

и найдем

$$\tau_{k+1} = \frac{(Ar_k, r_k)}{\|Ar_k\|^2}, k = 1, 2, \dots, \quad (2.23)$$

где $\|Ar_k\|^2 = (Ar_k, Ar_k)$, $k = 1, 2, \dots$

При этом значении τ_{k+1} вторая производная $\varphi''(\tau_{k+1}) > 0$ и, следовательно, достигается минимум $r_{k+1} = \min_{\tau_{k+1}} \|r_{k+1}\|^2$.

Если $A : A = A^* > 0$ самосопряженный оператор, то верны априорные оценки: $\|r_{k+1}\| \leq \rho_0 \|r_k\|$;

$$\|Ax_k - f\| < \rho_0^n \|Ax_0 - f\|, \quad (2.24)$$

где $\rho_0 = \frac{1-\xi}{1+\xi}$; $\xi = \frac{\gamma_1}{\gamma_2}$, а $\gamma_1 \in \gamma_2$ - точные границы спектра опера-

тора A , то есть собственные значения λ_S оператора A , лежат на отрезке $[\gamma_1, \gamma_2]$: $\lambda_S \in [\gamma_1, \gamma_2]$.

Вычисления проводят до тех пор, пока $\|r_k\|^2 > \varepsilon$. Если $\|r_k\|^2 < \varepsilon$, решением системы будет вектор x_{k+1} , который определяется по формуле: $x_{k+1} = x_k - r_k \tau_{k+1}$, где $\|r_k\|^2 = (Ar_k, r_k)$.

4.2 Метод скорейшего спуска

Этот метод отличается от метода минимальных невязок только формулой для определения τ_{k+1}

$$\tau_{k+1} = \frac{(r_k, r_k)}{(Ar_k, r_k)}, \quad r_k = Ax_k - f, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.25)$$

Эта формула может быть получена из условия минимума нормы $\|z_{k+1}\|_A$ погрешности $z_{k+1} = x_{k+1} - x$ или из условия ортогональности невязок r_k и r_{k+1} . Умножая скалярно уравнение $r_{k+1} = r_k - \tau_{k+1} Ar_k$ на r_k , получим, $(r_k, r_k) - \tau_{k+1} (Ar_k, r_k) = 0$ откуда следует формула (2.25).

Для z_{k+1} справедлива оценка:

$$\begin{aligned}\|z_{k+1}\|_A^2 &= \|(E - \tau_{k+1}A)z_k\|_A^2 \leq \|(E - \tau_0A)z_k\|_A^2 \\ &\leq \|E - \tau_0A\|_A^2 \|z_k\|_A^2 \leq \|z_{k+1}\|_A^2 = \|x_{k+1} - x\|_A^2 \\ &\leq \rho_0^n \|x_0 - x\|_A\end{aligned}$$

Метод скорейшего спуска сходится в пространстве H_A с той же скоростью, что и метод простой итерации.

Эти **релаксационные** методы основаны на принципе уменьшения функции ошибки.

Вопросы для самоконтроля

- 1 Какова особенность итерационных методов?
- 2 Приведите вычислительную схему метода итераций.
- 3 Каковы признаки сходимости метода итераций?
- 4 В чем заключается отличие метода Зейделя от метода итераций?
- 5 Каноническая форма итерационных методов?
- 6 Какие методы Вы относите к релаксационным методам?
- 7 В чем заключается схема метода минимальных невязок?
- 8 Что понимается под невязкой?
- 9 Какова вычислительная схема метода скорейшего спуска?

Тема 2 ВЫЧИСЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРОВ МАТРИЦЫ

Лекция 1 Вычисление собственных значений и собственных векторов матрицы

- 1 Характеристический многочлен матрицы
- 2 Метод Крылова
- 3 Метод Данилевского

1 Характеристический многочлен матрицы

Пусть $A = [a_{ij}]$ ($i, j = \overline{1, n}$) квадратичная матрица n -го порядка с действительными коэффициентами и λ_i некоторые неизвестные числа. Тогда матрица $(A - \lambda E)$, где E – единичная матрица n -го порядка называется **характеристической матрицей** матрицы A .

Характеристическую матрицу можно представить в виде:

$$A - \lambda E = \begin{bmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} - \lambda \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

Определитель этой матрицы называется характеристическим определителем

$$D(\lambda) = \det(A - \lambda E) \quad (1.2)$$

В развёрнутом виде $\det(A - \lambda E)$ есть многочлен n -ой степени относительно λ и имеет вид:

$$\det(A - \lambda E) = (-1)^n [\lambda^n + p_1 \lambda^{n-1} + \dots + p_n] = (-1)^n P_n(\lambda) \quad (1.3)$$

Многочлен (1.3) называется **характеристическим многочленом** матрицы A , а его корни $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ называются **собственными числами** или собственными значениями матрицы A . Числа P_i называются коэффициентами характерного многочлена.

Собственные числа могут быть как действительными, так и комплексно - сопряжёнными. Они характеризуются тем, что однородная система

$$Ax = \lambda x. \quad (1.4)$$

имеет ненулевое решение в том и только том случае, когда λ является собственным значением матрицы A . Отвечающие ему ненулевые решения системы называют **собственными векторами** матрицы, соответствующими значению λ . Каждому собственному значению λ_i соответствует свой собственный вектор $X^{(i)}, (i = \overline{1, n})$. Для определения координат собственного вектора составляется характеристическое уравнение

$$Ax - \lambda x = 0 \text{ или } (A - \lambda E)x = 0. \quad (1.5)$$

Так как собственный вектор ненулевой, то очевидно, что определитель $\det(A - \lambda E) = 0$ и из этого условия определяется собственное значение матрицы A . Следовательно, система (1.5) имеют бесчисленное множество решений и его можно решить с точностью до постоянного множителя. Решив эту систему для заданного λ_i , найдём координаты собственного вектора $X^{(i)}, (i = \overline{1, n})$. Собственные вектора можно пронормировать, то есть вынести постоянный множитель.

Таким образом, задача отыскания собственных значений и собственных векторов матрицы сводится к отысканию коэффициентов характеристического уравнения, отделения его корней, а затем к отысканию нетривиальных решений системы (1.4) в которой вместо λ подставлено одно из найденных собственных значений. Если для данного собственного значения система (1.4) имеет несколько линейно-независимых решений, то этому собственному значению соответствует несколько собственных векторов.

Все численные методы отыскания собственных значений и собственных векторов можно разделить на две группы.

1 Прямые методы, в которых сначала находится характеристическое уравнение, решая которое находят собственные значения матрицы, а потом, соответствующие им собственные вектора.

2 Итерационные методы, в которых собственные значения находятся как пределы некоторых числовых последовательностей без предварительного определения коэффициентов характеристического уравнения. При этом, как правило, вычисляются и собственные вектора.

Прямые методы применяются для решения полной проблемы собственных значений, т.е. находятся все собственные значения и все соответствующие им собственные вектора.

Итерационные методы чаще всего применяются к решению частичной проблемы собственных значений, т.е. к отысканию одного или нескольких собственных значений и отвечающих им собственных векторов.

2 Метод Крылова

Этот метод основан на свойстве невырожденной квадратичной матрицы обращать свой характеристический многочлен в нуль. Согласно тождеству Гамильтона-Кели всякая квадратичная матрица является корнем своего характеристического многочлена и, следовательно, обращает его в нуль.

Пусть

$$P_n(\lambda) = (-1)^n [\lambda^n + p_1 \lambda^{n-1} + p_2 \lambda^{n-2} + \dots + p_n] \quad (1.6)$$

– характеристический многочлен матрицы A .

Заменяем в равенстве (1.6) величину λ на $A = [a_{ij}]$ получим:

$$A^n + p_1 A^{n-1} + p_2 A^{n-2} + \dots + p_n E = 0 \quad (1.7)$$

Возьмём произвольный нулевой вектор

$$y^{(0)} = \begin{pmatrix} y_1^{(0)} \\ y_2^{(0)} \\ \dots \\ y_n^{(0)} \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

и умножив обе части равенства (1.7) справа на $y^{(0)}$, получим:

$$A^n y^{(0)} + p_1 A^{n-1} y^{(0)} + p_2 A^{n-2} y^{(0)} + \dots + p_n y^{(0)} = 0. \quad (1.9)$$

Положим

$$A^k y^{(0)} = y^{(k)}, \quad k = \overline{1, n}. \quad (1.10)$$

Тогда равенство (1.9) примет вид:

$$y^{(n)} + p_1 y^{(n-1)} + p_2 y^{(n-2)} + \dots + p_n y^{(0)} = 0 \quad (1.11)$$

или в развёрнутом виде придём к системе алгебраических выражений:

2.1 Вычисление собственных векторов по методу Крылова

Если известны коэффициенты p_1, p_2, \dots, p_n характеристического многочлена и собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, то метод Крылова даёт возможность найти собственные векторы по следующей формуле:

$$X^{(i)} = y^{(n-1)} + q_{1i}y^{(n-2)} + \dots + q_{n-1i}y^{(0)} \quad (i = \overline{1, n}) \quad (1.15)$$

Здесь $y^{(n-1)}, y^{(n-2)}, \dots, y^{(0)}$ векторы, которые использовались при нахождении коэффициентов p_i методом Крылова, а $q_{ji}, (j = \overline{1, n-1}, i = \overline{1, n})$ определяется по схеме Горнера

$$q_{01} = 1, \quad q_{ji} = \lambda_i q_{j-1,i} + p_j. \quad (1.15a)$$

Необходимо помнить, что соответствующие собственные вектора $X^{(i)}$ определяются по формуле (1.15) с точностью до произвольной постоянной.

Пример. Методом Крылова развернуть характеристический многочлен матрицы

$$\begin{cases} 9x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 35 \\ 2x_1 + 8x_2 + 4x_3 = 22 \\ 3x_1 + 4x_2 + 12x_3 = 37 \end{cases}.$$

Решение. Выберем произвольный ненулевой вектор

$$y^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Пользуясь формулами (1.13)

$$y^{(k)} = Ay^{(k-1)}, \quad k = \overline{1, n}$$

определим координаты векторов $y^{(k)}$. А именно:

$$y^{(1)} = Ay^{(0)} = \begin{pmatrix} 9 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \\ 3 & 4 & 12 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix},$$

$$y^{(2)} = Ay^{(1)} = \begin{pmatrix} 9 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \\ 3 & 4 & 12 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 9 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 94 \\ 46 \\ 71 \end{pmatrix},$$

$$y^{(3)} = Ay^{(2)} = \begin{pmatrix} 9 & 2 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \\ 3 & 4 & 12 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 94 \\ 46 \\ 71 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1151 \\ 840 \\ 1318 \end{pmatrix}.$$

Составляем систему (1.12), которая принимает вид:

$$\begin{pmatrix} 94 & 9 & 1 \\ 46 & 2 & 0 \\ 71 & 3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1151 \\ 840 \\ 1318 \end{pmatrix}.$$

Решая эту систему методом Гаусса, получим

$$p_1 = -29, \quad p_2 = 247, \quad p_3 = -648.$$

Таким образом, характеристический многочлен имеет вид

$$\begin{aligned} P_n(\lambda) &= \det(A - \lambda E) = -[\lambda^3 + p_1\lambda^2 + p_2\lambda + p_3] = \\ &= -(\lambda^3 - 29\lambda^2 + 247\lambda - 648) \end{aligned}$$

Приравнивая нулю и решая полученное уравнение известными методами, находим собственные значения

$$\lambda_1 \approx 16.26, \quad \lambda_2 \approx 7.22, \quad \lambda_3 \approx 5.52.$$

Для определения собственного вектора составляем уравнение (1.15):

$$\begin{aligned} x_1 &= 94 + 9 \cdot q_{11} + 1 \cdot q_{21} \\ x_2 &= 46 + 2 \cdot q_{12} + 0 \cdot q_{22} \cdot \\ x_3 &= 71 + 3 \cdot q_{13} + 0 \cdot q_{23} \end{aligned}$$

Коэффициенты q_{ji} находим по схеме Горнера (1.15a):

$$\begin{aligned} q_{11} &= \lambda_1 q_{01} + p_1 = 16.26 \cdot 1 - 29 \approx -12.74, \\ q_{21} &= \lambda_1 q_{11} + p_2 = -16.26 \cdot 12.74 + 247 \approx 39.85, \\ q_{12} &= \lambda_2 q_{02} + p_1 = 7.22 \cdot 1 - 29 \approx -21.78, \\ q_{13} &= \lambda_3 q_{03} + p_1 = 5.52 \cdot 1 - 29 \approx -23.48. \end{aligned}$$

Следовательно

$$x_1 \approx 19.19, \quad x_2 \approx 2.44, \quad x_3 \approx 0.46.$$

3 Метод Данилевского

В нём используется основное свойство подобных матриц. Две матрицы A и B называются подобными, если одна получается из другой путём следующего преобразования подобия $B = M^{-1}AM$, где M – некоторая не особая матрица.

Известно, что подобные матрицы имеют одинаковые характеристические многочлены. Заданную матрицу A :

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

необходимо привести к матрице Фробениуса:

$$F = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & \dots & f_{1n} \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

с помощью преобразования подобия и затем составить определить

$$\det(F - \lambda E) = \begin{bmatrix} f_{11} - \lambda & f_{12} & f_{13} & \dots & f_{1n} \\ 1 & -\lambda & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}.$$

Разложив его по элементам первой строки, получим характеристический многочлен матрицы Фробениуса.

$$P_n(\lambda) = \det(F - \lambda E) = (-1)^n [\lambda^n + p_1 \lambda^{n-1} + \dots + p_n] \quad (1.16)$$

$p_1 = f_{11}$, $p_2 = f_{12}$, ..., $p_n = f_{1n}$ - коэффициенты характеристического многочлена матрицы Фробениуса.

В силу подобия матриц характеристический многочлен (1.16) будет являться характеристическим многочленом матрицы A .

По методу Данилевского переход матрицы A к подобной ей матрице Фробениуса осуществляется с помощью $(n-1)$ преобразования подобия. Последовательно преобразовываются строки матрицы A в строки матрицы Фробениуса, начиная с последней строки.

Матрица M_{n-1} формируется из единичной матрицы после таких же преобразований, что и над матрицей A .

$$M_{n-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ m_{n-11} & m_{n-12} & \dots & m_{n-1n} \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

где

$$m_{n-1,i} = -\frac{a_{n,i}}{a_{n,n-1}}; \quad m_{n-1,n-1} = \frac{1}{a_{n,n-1}} \quad (1.17)$$

M_{n-1}^{-1} получается из единичной, если на $n-1$ -ой строке записать коэффициенты n -ой строки матрицы A .

$$M_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

Строим матрицу $B = AM_{n-1}$, а затем $C = M_{n-1}^{-1}B$ в результате получим матрицу C подобную матрице A с одной приведённой строкой к матрице Фробениуса, следовательно $C = M_{n-1}^{-1}AM_{n-1}$.

Потом построим $D = CM_{n-2}$ и $E = M_{n-2}^{-1}D$ имеет вид

$$E = M_{n-2}^{-1}M_{n-1}^{-1}AM_{n-1}M_{n-2}.$$

В результате $n-1$ -го преобразования придём к матрице Фробениуса

$$F = M_1^{-1}M_2^{-1} \dots M_{n-1}^{-1}AM_{n-1}M_{n-2} \dots M_1$$

Если в некоторой матрице преобразование подобия элемент $e_{n-2,n-2} = 0$, то нужно поменять местами строки.

3.1 Вычисление собственных векторов по методу Данилевского

Пусть $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$ - собственный вектор матрицы Фробениуса соответствующий значению λ . Тогда $Fy = \lambda y$. Откуда

$$(F - \lambda E)y = 0 \quad (1.18)$$

и, следовательно, произведя умножение, получим систему уравнений для нахождения координат y_1, y_2, \dots, y_n собственного вектора матрицы Фробениуса:

$$\begin{cases} (f_{11} - \lambda)y_1 + f_{12}y_2 + \dots + f_{1n}y_n = 0 \\ y_1 - \lambda y_2 = 0 \\ \dots \\ y_{n-1} - \lambda y_n = 0 \end{cases}$$

С точностью до коэффициента пропорциональности её решение можно найти, задав произвольно y_n (например $y_n = 1$).

$$\begin{aligned} y_{n-1} &= \lambda & y_{n-2} &= \lambda y_{n-1} = \lambda^2 \\ y_1 &= \lambda^{n-1} & y &= (\lambda^{n-1}, \lambda^{n-2}, \dots, 1) \end{aligned} \quad (1.19)$$

Так как матрица F подобна матрице A , то λ является собственным значением матрицы A . Обозначим $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ собственный вектор матрицы A соответствующим собственному значению λ , следовательно,

$$X = M_{n-1}M_{n-2} \dots M_1 y, \quad (1.20)$$

где M_i матрицы преобразования по методу Данилевского.

Вопросы для самоконтроля

- 1 Понятие характеристического многочлена?
- 2 В чем заключается смысл прямых и итерационных методов в решении проблемы собственных значений?
- 3 Какие прямые методы Вы знаете?
- 4 Вычислительная схема метода Крылова?
- 5 Вычислительная схема метода Данилевского?
- 6 Как происходит вычисление собственных векторов по методу Крылова?
- 7 Как происходит вычисление собственных векторов по методу Данилевского?
- 8 Какую проблему собственных значений решают методы Крылова и Данилевского?

Лекция 2 Итерационные методы решения проблемы собственных значений

- 1 Итерационный метод вращения
- 2 Нахождение наибольшего по модулю собственного значения матрицы и соответствующего собственного вектора
- 3 Определение второго собственного значения и второго собственного вектора

1 Итерационный метод вращения

Всякая симметричная действительная матрица A может быть приведена подобными преобразованиями к диагональному виду

$$A = U \lambda U^{-1} \quad , \quad (2.1)$$

где U – ортогональная, λ – диагональная, элементами которой являются собственными значениями $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ матрицы A . Так как для ортогональных матриц обратная совпадает с транспонированной ($U = U^{-1}$), равенство (2.1) равносильно следующему:

$$U A U^{-1} = \lambda \quad (2.2)$$

Это равенство даёт возможность построить бесконечно много алгоритмов для приближённого вычисления матрицы λ , отличающихся между собой способами построения матрицы U . В основании методов лежит следующий факт:

пусть каким-либо ортогональным преобразованием с матрицей U мы привели матрицу A к некоторой матрице λ , мало отличающейся от диагональной, и получили равенство:

$$U' A U = \lambda \quad (2.3)$$

$$\lambda = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \dots & \lambda_{1n} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \dots & \lambda_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda_{n1} & \lambda_{n2} & \dots & \lambda_{nn} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Собственные значения матриц A и λ совпадают между собой. Если бы оказалось, что все недиагональные элементы λ_{ij} ($i \neq j$) в λ равны 0, то равенства (2.2) и (2.3) совпали бы и собственные значения матрицы A были бы равны диагональным элементам λ_{ii} в λ .

Если же недиагональные элементы λ_{ij} ($i \neq j$) не все равны 0, но все будут иметь малые значения, то следует ожидать, что собственные значения матрицы A будут близкими к λ_i ($i = \overline{1, n}$) и λ_{ii} могут быть приняты за приближенные величины этих значений.

Для использования равенства (2.2) нужно построить последовательность ортогональных преобразований, позволяющих неограниченно уменьшать модули недиагональных элементов матрицы A .

Меру близости A к диагональному методу целесообразно определять следующим образом: введём сумму квадратов модулей недиагональных элементов по строкам и запишем:

$$\sigma_i(A) = \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2, \quad i = \overline{1, n}, \quad i \neq j \quad (2.5)$$

и за нужную нам величину примем число:

$$t(A) = \sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n = \sum_{i \neq j} |a_{ij}|^2 \quad (2.6)$$

Пусть с помощью преобразования подобия с ортогональными матрицами построена последовательность матриц $A^0 = A, A^1, \dots, A^k$. Процесс построения называется *монотонным*, если $t(A^k) < t(A^{k-1})$. Таких процессов может быть построено большое число.

1.1 Метод вращений Якоби

По заданной матрице A будем строить последовательность матриц (A^k) . Такую, что каждая следующая матрица A^{k+1} получается из предыдущей матрицы A^k при помощи преобразования подобия со следующей ортогональной матрицей вращения:

$$U_{ij}(\varphi) = \begin{bmatrix} 1 & & & & 0 \\ & 1 & & & 0 \\ & & \cos \varphi & -\sin \varphi & \\ & & \sin \varphi & \cos \varphi & \\ & 0 & & & 1 \\ 0 & & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} i \\ j \\ \\ j \\ \\ 1 \end{matrix} \quad (2.7)$$

где индексы $i \text{ \textasciitilde } j$ определены из условия $a_{ij}^k = \max_{i < j} a_{ij}^k$

Предположим, преобразование доведено до шага k и построена матрица $A^k = [a_{ij}^k]$. Найдём в ней наибольший по модулю недиагональный элемент. Пусть это a_{ij}^k . В виду симметричности A^k , можно считать $i < j$. Если таких элементов несколько, можно взять любой из них. По индексам $i \text{ \textasciitilde } j$ строим матрицу вращения $U_{ij}^k = U_{ij}^k(\varphi^k)$, в которой угол φ^k определим ниже.

Образует после этого матрицу

$$A^{k+1} = U_{ij}^{k'} A^k U_{ij}^k \quad (2.8)$$

Для упрощения записи введём обозначение $B^k = A^k U_{ij}^k$, $B^k = [b_{ij}^k]$.

В виду определения матрицы (2.7) все столбцы B^k , кроме $i \text{ \textasciitilde } j$, будут такими же как и в A^k . Элементы же столбцов номеров $i \text{ \textasciitilde } j$ вычисляются по формулам:

$$\begin{cases} b_{vi}^k = a_{vi}^k \cos j^k + a_{vj}^k \sin j^k \\ b_{vj}^k = -a_{vi}^k \sin j^k + a_{vj}^k \cos j^k \end{cases}, \quad v = \overline{1, n} \quad (2.9)$$

Аналогично, строки $A^{k+1} = U_{ij}^k B^k$, кроме $i \neq j$ будут такими же, как в B^k , а элементы $i \neq j$ строк вычисляются по формулам:

$$\begin{cases} a_{iv}^{k+1} = b_{iv}^k \cos \varphi^k + b_{jv}^k \sin \varphi^k \\ a_{jv}^{k+1} = -b_{iv}^k \sin \varphi^k + b_{jv}^k \cos \varphi^k, v = \overline{1, n} \end{cases}$$

Равенства (2.9) и (2.10) позволяют легко вычислить a_{ij}^{k+1} :

$$\begin{aligned} a_{ij}^{k+1} &= b_{ij}^k \cos \varphi^k + b_{jj}^k \sin \varphi^k = \\ &= (-a_{ii}^k \sin \varphi^k + a_{ij}^k \cos \varphi^k) \cos \varphi^k + (-a_{ji}^k \sin \varphi^k + a_{jj}^k \cos \varphi^k) \sin \varphi^k \\ &\text{или так как } a_{ij}^k = a_{ji}^k \text{ (симметрия), то значит:} \end{aligned}$$

$$a_{ij}^{k+1} = a_{ij}^k \cos 2\varphi^k + \frac{1}{2}(a_{jj}^k - a_{ii}^k) \sin 2\varphi^k \quad (2.11)$$

Выберем теперь φ^k таким образом, чтобы a_{ij}^{k+1} обратился в 0. Это требование даёт:

$$\operatorname{tg} 2\varphi^k = \frac{2a_{ij}^k}{a_{ii}^k - a_{jj}^k} = p^k$$

Откуда следует, что

$$\varphi^k = \frac{1}{2} \operatorname{arctg} p^k \quad (2.12).$$

Что касается значения меры $t(A^k)$ близости A^k к диагональной форме, то пользуясь симметричностью A и соотношениями (2.9)-(2.11), можно показать, что

$$t(A^{k+1}) = t(A^k) - 2(a_{ij}^k)^2 \quad (2.13).$$

Т.к. a_{ij}^k есть наибольший недиагональный элемент и он предполагается отличным от 0 (если $a_{ij}^k = 0$, то A^k были бы собственным значениям матрицы A и переход к A^{k+1} не нужен), верно неравенство $t(A^{k+1}) \leq t(A^k)$ и $t(A^k)$ уменьшается при переходе к A^{k+1} .

По выбору a_{ij}^k можно оценить скорость сходимости и скорость стремления $t(A^k)$ к нулю, если воспользоваться неравенством:

$$t(A^k) \leq n(n-1)(a_{ij}^k)^2$$

и следовательно,

$$(a_{ij}^k)^2 \geq \frac{t(A^k)}{n(n-1)}. \quad (2.14)$$

С помощью этого неравенства и из (2.13) получается:

$$t(A^{k+1}) \leq t(A^k) - \frac{2}{n(n-1)}t(A^k) = q \cdot t(A^k),$$

где $0 \leq q = 1 - \frac{2}{n(n-1)} < 1$ ввиду того, что $n \geq 2$.

Отсюда вытекает цепь неравенств:

$$t(A^k) \leq qt(A^{k-1}) \leq \dots \leq q^k t(A^0)$$

Так как $A^0 = 0$, то $t(A^k) \leq q^k t(A)$, следовательно $t(A^k) \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$ со скоростью, не меньшей скорости геометрической со знаменателем $q < 1$.

2 Нахождение наибольшего по модулю собственного значения матрицы и соответствующего собственного вектора

Пусть имеем характеристическое уравнение $D(y) = \det(A - \lambda E) = 0$. Корни этого уравнения $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ являются собственными значениями матрицы A . Пусть им соответствуют линейно независимые собственные вектора x^1, x^2, \dots, x^n . Рассмотрим итерационный метод вычисления наибольшего по модулю собственного значения матрицы A не требующего раскрытия векового определителя.

Пусть среди собственных значений матрицы A есть одно наибольшее по модулю. Для определенности положим

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|. \quad (2.15)$$

Так, что наибольшим по модулю является первое собственное значение. Очевидно, что для действительной матрицы наибольшее по модулю собственное значение матрицы A λ_1 будет действительным. Такой случай всегда имеет место, если матрица A действительна и её элементы положительны.

Определим λ_1 . Для этого возьмем произвольный вектор $y = (y_1 \dots y_n)^T$ и разложим его по собственным векторам матрицы A .

$$y = \sum_{j=1}^n c_j x^j, \text{ где } c_j - \text{ постоянные коэффициенты } j = \overline{1, n}.$$

Произведя преобразования A над вектором y , получим:

$$Ay = \sum_{j=1}^n c_j (Ax)^j.$$

Отсюда т.к. x^j собственный вектор преобразования A получим, что $Ax^j = \lambda x^j$ и тогда получим:

$$Ay = \sum_{j=1}^n c_j \lambda_j x^j.$$

Величину Ay называют итерацией над вектором y .

Последовательно образуя итерации $Ay, A^2y, \dots, A^m y$, находим, что:

$$y^m = A^m y = \sum_{j=1}^n c_j \lambda_j^m x^j \quad (2.16)$$

– m – тая итерация.

Пусть $y^m = A^m y$ $m=1, 2, \dots$ и $y = \begin{bmatrix} y^m_1 \\ y^m_2 \\ \dots \\ y^m_n \end{bmatrix}$, где y^m_i ($i = \overline{1, n}$) координаты y^m в выбранном базисе e_1, e_2, \dots, e_n .

Разлагая собственные вектора x^j по векторам базиса, можем записать выражение для составляющих вектора y :

$$y_i^m = \sum_{j=1}^n c_j \lambda_j^m x_{ij} \quad (2.17)$$

$m - \text{à}$ итерация. Аналогично

$$y_i^{m+1} = \sum_{j=1}^n c_j \lambda_j^{m+1} x_{ij} \quad (2.18)$$

Разделив (2.18) на (2.17) получим:

$$\frac{y_i^{m+1}}{y_i^m} = \frac{c_1 \lambda_1^{m+1} x_{i1} + c_2 \lambda_2^{m+1} x_{i2} + \dots + c_n \lambda_n^{m+1} x_{in}}{c_1 \lambda_1^m x_{i1} + c_2 \lambda_2^m x_{i2} + \dots + c_n \lambda_n^m x_{in}} \quad (2.19)$$

Пусть $c_1 \neq 0$ и $x_{i1} \neq 0$, что можно всегда получить, выбирая надлежащим образом, исходный вектор y и базис e_1, e_2, \dots, e_n . Преобразуем выражение (2.19) к виду:

$$\frac{y_i^{m+1}}{y_i^m} = \lambda_1 \cdot \frac{1 + \frac{c_2 x_{i2}}{c_1 x_{i1}} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{m+1} + \dots + \frac{c_n x_{in}}{c_1 x_{i1}} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^{m+1}}{1 + \frac{c_2 x_{i2}}{c_1 x_{i1}} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^m + \dots + \frac{c_n x_{in}}{c_1 x_{i1}} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^m}.$$

Переходя к пределу при $m \rightarrow \infty$, и учитывая неравенство (2.15) получим:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{y_i^{m+1}}{y_i^m} = \lambda_1 \quad (2.20)$$

Можем записать:

$$\lambda_1 \approx \frac{y_i^{m+1}}{y_i^m}, \quad \forall i = \overline{1, n} \quad (2.21)$$

а точнее

$$\lambda_1 = \frac{y_i^{m+1}}{y_i^m} + o\left(\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^m\right) \quad \forall i = \overline{1, n}$$

Для достаточно большого номера итерации m можем с любой степенью точности с помощью формулы (2.21) определить наибольшее по модулю корень λ_1 характеристического многочлена матрицы A . Для

получения более точного значения корня λ_1 следует взять среднее арифметическое из суммы отношений координат вектора y .

$$\frac{y_1^{m+1}}{y_1^m} \approx \frac{y_2^{m+1}}{y_2^m} \approx \dots \approx \frac{y_n^{m+1}}{y_n^m}, \text{ следовательно, считают}$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{y_i^{m+1}}{y_i^m}.$$

Собственный вектор матрица A соответствующий λ_1 приближенно можем взять, полагая, что $x^1 = y^m = A^m y$, т.к. $A^m y = c_1 \lambda_1^m x^1$, т.е. $A^m y$ лишь числовым множителем отличается от собственного вектора x^1 и поэтому является собственным вектором соответствующим λ_1 .

Пример:

Найти наибольшее собственное значение матрицы A и собственный вектор:

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Решение.

1. Выберем начальный вектор $y = (1, 1, 1)$.
2. Составим итерации, например, для $m = 10$ $y^1 = Ay^0$; $y^2 = A^2 y = Ay^1$; ...; $y^{10} = A^{10} y$.
3. Для различных координат вектора y следует воспользоваться формулой (2.21), а результаты итераций сведем в таблицу:

| y^0 | $y^1 = Ay^0$ | ... | $A^7 y$ | $A^8 y$ | $y^9 = A^9 y$ | $y^{10} = A^{10} y$ |
|-------|--------------|-----|---------|---------|---------------|---------------------|
| 1 | 4 | | 10260 | 62973 | 243569 | 941378 |
| 1 | 5 | | 14193 | 54630 | 210663 | 812585 |
| 1 | 2 | | 5002 | 19193 | 73845 | 284508 |

$$\lambda_{11} \approx \frac{y_1^{10}}{y_1^9} = \frac{941370}{243569} \approx 3,865$$

$$\lambda_{12} \approx \frac{y_2^{10}}{y_2^9} = \frac{812585}{210663} \approx 3,857$$

$$\lambda_{13} \approx \frac{y_3^{10}}{y_3^9} = \frac{284508}{73845} \approx 3,853$$

4. Вычислим λ_1 как среднее арифметическое из $\lambda_{11}, \lambda_{12}, \lambda_{13}$.

$$\lambda_1 = \frac{\lambda_{11} + \lambda_{12} + \lambda_{13}}{3} = 3,858$$

5. В качестве 1-го собственного вектора матрицы A можно взять вектор $y^{10} = A^{10}y = \begin{bmatrix} 941376 \\ 812585 \\ 284508 \end{bmatrix}$. Нормируя этот вектор, т.е. разделив его на

норму вектора $\|y^{10}\| = \sqrt{941376^2 + 812586^2 + 284508^2} = 1,28 \cdot 10^6$. Получим 1-ый собственный вектор матрицы A , принадлежащий собственному значению $\lambda_1 = 3,858$

$$x_1 = \begin{bmatrix} 0,74 \\ 0,64 \\ 0,22 \end{bmatrix}$$

3 Определение второго собственного значения и второго собственного вектора

Пусть собственное значение λ_j ($j = \overline{1, n}$) матрицы A таковы, что

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n| \quad (2.22)$$

т.е. имеется два различных наибольших по модулю собственных значения λ_1 и λ_2 матрицы A . Итерационным способом найдем второе собственное значение λ_2 , отвечающее собственному вектору x^2 . Так как

$$A^m y = c_1 \lambda_1^m x^1 + c_2 \lambda_2^m x^2 + \dots + c_n \lambda_n^m x^n \quad (2.23)$$

$$A^{m+1} y = c_1 \lambda_1^{m+1} x^1 + c_2 \lambda_2^{m+1} x^2 + \dots + c_n \lambda_n^{m+1} x^n. \quad (2.24)$$

Исключим λ_1 . Для этого из равенства (2.24) вычтем равенство (2.23), умноженное на λ_1 в результате получим:

$$A^{m+1} y - \lambda_1 A^m y = c_2 \lambda_2^m (\lambda_2 - \lambda_1) x^2 + \dots + c_n \lambda_n^{m+1} (\lambda_n - \lambda_1) x^n. \quad (2.25)$$

Выражение $\Delta_{\lambda} A^m y = A^{m+1} y - \lambda A^m y$ называется \square - разностью от $A^m y$. Если $c_2 \neq 0$, то первое слагаемое в правой части (2.25) является её главным членом при $m \rightarrow \infty$ и мы имеем приближенное равенство:

$$\Delta_{\lambda_1} A^m y \approx c_2 \lambda_2^m (\lambda_2 - \lambda_1) x^2 \quad (2.26)$$

отсюда

$$\Delta_{\lambda_1} A^{m-1} y \approx c_2 \lambda_2^{m-1} (\lambda_2 - \lambda_1) x^2. \quad (2.27)$$

Из (2.26) и (2.27) следует что:

$$\lambda_2 \approx \frac{\Delta_{\lambda_1} y_i^m}{\Delta_{\lambda_1} y_i^{m-1}} = \frac{y_i^{m+1} - \lambda_1 y_i^m}{y_i^m - \lambda_1 y_i^{m-1}} \quad (i = \overline{1, n}) \quad (2.28)$$

Пользуясь (2.28) формулой можно приближенно вычислить второе собственное значение λ_2 .

Отметим, что на практике ввиду потери точности при вычислении близких чисел иногда выгоднее номер итерации k для определения \square брать меньше, чем номер итерации m при нахождении λ_1 , т.е целесообразно пользоваться формулой:

$$\lambda_i \approx \frac{y_i^{k+1} - \lambda_1 y_i^k}{y_i^k - \lambda_1 y_i^{k-1}} \quad k < m, \quad (2.29)$$

где k – наименьшее из чисел при котором начинает сказываться преобладание λ_2 над λ_1 .

Формула (2.29) дает, вообще говоря, грубые значения для \square , оно может отличаться от λ_2 полученного по формуле Крылова или Данилевского. Заметим, что если все собственные значения матрицы A отличны друг от друга, т.е. нет кратных собственных значений то при помощи формул аналогичных (2.29) можно вычислить все собственные

значения матрицы A , принимая m достаточно большим. Для определения 3-го собственного значения следует брать λ -разность второго порядка. Однако точность вычислений последующих значений не будет достигнута. Собственный вектор x^2 соответствующий второму собственному значению λ_2 матрицы A согласно формуле (2.26) можем определить положив

$$x^2 = \Delta_{\lambda_1} y^k. \quad (2.30)$$

Пример:

Для матрицы $A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ найти λ_2 и соответствующий ему собственный вектор x^2 .

Решение.

За номер итерации k примем 8. Из предыдущего примера возьмем $A^m y$ для $m=7,8,9$. Составим λ -разность $\Delta_{\lambda_1} y_i^m = y_i^{m+1} - \lambda_1 y_i^m$ ($i=1,2,3$)

| $\Delta_{\lambda_1} A^7 y$ | $\lambda_1 A^8 y$ | $\Delta_{\lambda_1} A^8 y$ |
|----------------------------|-------------------|----------------------------|
| 128 | 243390 | 179 |
| -92 | 210785 | -122 |
| -77 | 73958 | -113 |

Для каждой из строк примем своё λ :

$$\lambda_{11} = 3,865$$

$$\lambda_{12} = 3,857$$

$$\lambda_{13} = 3,853$$

Для каждой итерации по формуле (2.28) или (2.29) вычислим:

$$\lambda_{21} \approx \frac{\Delta_{\lambda_1} y_1^8}{\Delta_{\lambda_1} y_1^7} = \frac{179}{128} = 1,400; \lambda_{22} \approx \frac{\Delta_{\lambda_1} y_2^8}{\Delta_{\lambda_1} y_2^7} = \frac{-122}{-92} = 1,326; \lambda_{23} \approx \frac{\Delta_{\lambda_1} y_3^8}{\Delta_{\lambda_1} y_3^7} = \frac{-113}{-77} = 1,468$$

$$\lambda_2 = \frac{1,4 + 1,326 + 1,468}{3} = 1,398.$$

В качестве 2-го собственного вектора (2.30) принимаем:

$$x^2 = \Delta_{\lambda_1} A^8 y = \begin{bmatrix} 179 \\ -122 \\ -113 \end{bmatrix}, \text{ нормируя его, получим: } x^2 = \begin{bmatrix} 0,73 \\ -0,50 \\ -0,46 \end{bmatrix}.$$

Для данной матрицы можно найти третье собственное значение, зная след матрицы SpA .

$$SpA = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3,$$

так как $SpA = 3 + 2 + 1 = 6$, то $\lambda_3 \approx 6 - 3,858 - 1,398 = 0,744$.

Вопросы для самоконтроля

- 1 В чем заключается смысл итерационных методов?
- 2 Приведите вычислительную схему метода Якоби (вращений)?
- 3 Какую проблему собственных значений решает метод Якоби?
- 4 Как находится наибольшее по модулю собственное значение?
- 5 Как находится второе собственное значение?
- 6 Как определяются собственные вектора в итерационных методах?
- 7 Что Вы можете сказать о точности вычислений в итерационных методах?

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Березин, И.С. Методы вычислений: в 2 т. Т.1. / И.С.Березин, Н.П.Жидков. – М.: Наука, 1966. – 630с.
- 2 Демидович, Б.П. Численные метода анализа / Б.П. Демидович, И.А. Марон, Э.З. Шувалова. – М.: Наука, 1967. – 368с.
- 3 Демидович, Б.П. Основы вычислительной математики / Б.П. Демидович, И.А. Марон. – М.: Наука, 1970. – 664с.
- 4 Самарский, А.А. Введение в численные методы / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1972. – 271с.
- 5 Бахвалов, Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов. – М.: Наука, 1973. – 632с.
- 6 Крылов, В.И. Вычислительные методы: в 2 т. Т.1. / В.И. Крылов, В.В. Бобков, П.И. Монастырний. – М.: Наука, 1976. – 304с.
- 7 Крылов, В.И. Вычислительные методы: в 2 т. Т.2. / В.И. Крылов, В.В. Бобков, П.И. Монастырний. – М.: Наука, 1977. – 400с.
- 8 Сборник задач по методам вычислений / под ред. П.И. Монастырного. – Мн.: БГУ, 1983. – 287с.
- 9 Фурунжиев, Р.И. Применение математических методов и ЭВМ / Р.И. Фурунжиев, Ф.М. Бабушкин, В.В. Варавко. – Мн.: Выш. шк., 1988. – 191с.
- 10 Калиткин, Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин. – М.: Наука, 1978. – 512с.
- 11 Воробьева, Г.Н. Практикум по вычислительной математике / Г.Н. Воробьева, А.Н. Данилова. – М.: Высш. школа, 1990. – 208с.
- 12 Бахвалов, Н.С. Численные методы в задачах и упражнениях / Н.С. Бахвалов, А.В. Лапин, Е.В. Чижонков. – М.: Высш. школа, 2000. – 230с.
- 13 Бахвалов, Н.С. Численные методы : учеб. Пособие для физ.-мат. специальностей вузов / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков; под общ. ред. Н.И. Тихонова. – 2-е изд. – М.: Физмалит: Лаб. базовых данных; СПб.: Нев.диалект, 2002. – 630с.
- 14 Вержбицкий, В.М. Численные методы. Линейная алгебра и нелинейные уравнения : учебное пособие для вузов / В.М. Вержбицкий. – М.: Высшая школа, 2000. – 146с.
- 15 Вержбицкий, В.М. Численные методы. Математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения : учебное пособие для вузов / В.М. Вержбицкий. – М.: Высшая школа, 2001. – 128с.

16 Ерофеенко, В.Т. Уравнения с частными производными с приложениями в экономике : курс лекций / В.Т. Ерофеенко, И.С. Козловская. – Мн.: БГУ, 2001. – 196с.

17 Численные методы : лабораторный практикум. Ч.1 / С.И. Голик [и др.]. М-во образования РБ, Гомельский гос. ун-т им. Ф.Скорины. – Гомель: ГГУ им. Ф.Скорины, 2001. – 60с.

18 Березовская, Е.М. Методы численного анализа : тексты лекций для студентов вузов специальности 1-31 03 06 «Экономическая кибернетика»: в 2 ч. Ч.1. Интерполяция и интегрирование / Е.М. Березовская; М-во образования РБ, Гомельский гос. ун-т им. Ф. Скорины. – Гомель: ГГУ им. Ф.Скорины, 2007. – 131с.

19 Березовская, Е.М. Методы вычислений: тексты лекций для студентов вузов специальности 1-31 03 01-02 «Математика (научно-педагогическая деятельность)»: в 2 ч. Ч.1. Интерполирование и нелинейные уравнения / Е. М. Березовская, М. И. Жадан; М-во образования РБ, Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины. – Гомель : ГГУ им. Ф.Скорины, 2010. – 80с.

20 Березовская, Е.М. Методы вычислений: практическое пособие для студентов вузов специальности 1-31 03 01-02 «Математика (научно-педагогическая деятельность)»: в 2 ч. Ч.1 / Е. М. Березовская; М-во образования РБ, Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины. – Гомель : ГГУ им. Ф.Скорины, 2010. – 48с.