

Wartości i wektory własne

Wektorem własnym macierzy $A_{[n \times n]}$ nazywamy każdy niezerowy wektor V , który zachowuje kierunek po wykonaniu mnożenia przez tę macierz:

$$A \cdot V = \lambda \cdot V \quad . \quad (1)$$

Wielkość λ jest wartością własną macierzy A odpowiadającą wektorowi własnemu V .

Rzeczywista i symetryczna macierz A posiada wyłącznie rzeczywiste wartości własne, oraz zbiór n liniowo niezależnych wektorów własnych oznaczonych V_1, V_2, \dots, V_n . Wektory te oczywiście nie są wyznaczone jednoznacznie, ponieważ każdy z nich może zostać pomnożony przez niezerową stałą, dalej pozostając wektorem własnym (definicja).

Każdy wektor własny ma odpowiadającą wartość własną, oznaczoną $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Wartości własne dla danej macierzy są określone jednoznacznie. Zbiór wszystkich wartości własnych macierzy nazywamy *spektrum* tej macierzy.

Równaniem charakterystycznym macierzy A nazywamy równanie:

$$\det(A - \lambda \cdot I) = p(\lambda) = 0 \quad , \quad (2)$$

w którym $I_{[n \times n]}$ oznacza macierz jednostkową. Wyrażenie stojące po lewej stronie tego równania jest wielomianem p stopnia n zmiennej λ . Tak więc wyznaczenie spektrum macierzy A jest równoznaczne z wyznaczeniem wszystkich pierwiastków równania (2).

Macierz A jest pierwiastkiem własnego równania charakterystycznego, czyli:

$$p(A) = 0 \quad . \quad (3)$$

Twierdzenie powyższe nosi nazwę twierdzenia Cayleya – Hamiltona. Ponadto, jeżeli $q(x)$ jest wielomianem a λ wartością własną macierzy A to $q(\lambda)$ jest wartością własną macierzy $q(A)$.

Przekształcenie przez podobieństwo nie zmienia wartości własnych macierzy, czyli jeżeli istnieje odwracalna macierz $P_{[n \times n]}$ to wartości własne macierzy $P^{-1} \cdot A \cdot P$ i macierzy A są równe.

Przekształcenie ortogonalne nie zmienia wartości własnych macierzy, czyli jeżeli istnieje odwracalna macierz $Q_{[n \times n]}$ taka, że $Q^T \cdot Q = I$ to wartości własne macierzy $Q^T \cdot A \cdot Q$ i macierzy A są równe (wniosek z twierdzenia poprzedniego).

Dla symetrycznej dodatnio określonej macierzy A i niezerowego wektora X zachodzi związek:

$$0 < \lambda_{\min} \leq \frac{X^T \cdot A \cdot X}{X^T \cdot X} \leq \lambda_{\max} \quad . \quad (4)$$

Do oszacowania spektrum wartości własnych dowolnej macierzy kwadratowej możemy użyć twierdzenia Gerszgorina, natomiast w przypadku symetrycznej macierzy trójdzielnej możemy zastosować ciąg Sturm'a do określenia z dowolną dokładnością przedziałów, w których znajdują się jej poszczególne wartości własne.

Numeryczne wyznaczanie wartości własnych macierzy jest jednym z bardziej żmudnych zadań podstawowej analizy numerycznej. Jednak ze względu na zastosowania praktyczne zostało opracowanych wiele metod służących do rozwiązania tego zagadnienia. Metody te można podzielić na trzy kategorie:

- metody pozwalające na znalezienie wszystkich wartości i wektorów własnych, np. metody: Jacobiego zwana również metodą transformacji ortogonalnych, Lanczosa i Hausholdera w połączeniu z metodą rozkładu $Q \cdot R$;
- metody pozwalające na wyznaczenie wybranej wartości i odpowiadającego jej wektora własnego, np. metoda potęgowa, w ogólności pozwalająca na wyznaczenie wartości własnej najbliższej podanej liczbie i odpowiadającego jej wektora własnego;
- metody pozwalające na obliczenie grupy wartości własnych i odpowiadających im wektorów własnych.

Przed wyborem metody obliczeń należy wobec powyższego, ze względu na efektywność czasową obliczeń, zastanowić się, czy będą nam potrzebne wszystkie wartości własne analizowanej macierzy, czy tylko ich wybrany podzbiór, czy też jedna jedyna wartość własna spełniająca określone warunki.

W dalszej części pracy zajmiemy się dwiema metodami wyznaczania wartości własnych rzeczywistej macierzy symetrycznej.

Metoda Jacobiego

Metoda Jacobiego (transformacji ortogonalnych) polega na wykonaniu na wyjściowej macierzy $A_{[n \times n]}$ ciągu transformacji ortogonalnych, w wyniku których macierz ta zostanie doprowadzona do postaci diagonalnej $D_{[n \times n]}$. W macierzy diagonalnej na przekątnej głównej znajdują się wartości własne macierzy wyjściowej, natomiast wektory własne odpowiadające tym wartościom własnym będą zapisane w kolumnach macierzy $W_{[n \times n]}$.

$$A = W \cdot D \cdot W^T \quad , \quad (5)$$

gdzie:

$$W = Q^{\{m\}} \cdot \dots \cdot Q^{\{i\}} \cdot \dots \cdot Q^{\{2\}} \cdot Q^{\{1\}} \quad . \quad (6)$$

jest iloczynem macierzy $Q^{\{i\}}$ definiujących kolejne transformacje ortogonalne $i = 1, 2, \dots, m$.

Transformacje ortogonalne są wykonywane w taki sposób, aby kolejno zerować pary elementów macierzy A rozmieszczonych symetrycznie względem przekątnej głównej i największych co do modułu. Tak więc algorytm metody można rozbić na następujące kroki:

1. Wybór elementu wiodącego transformacji ortogonalnej, czyli wyznaczenie indeksów p i q elementu macierzy A największego co do modułu, a nie leżącego na przekątnej głównej tej macierzy:

$$p, q : |a_{pq}^{\{i\}}| = \max_{\substack{k, l=1, 2, \dots, n \\ k \neq l}} |a_{kl}^{\{i\}}| \quad . \quad (7)$$

2. Wyznaczenie macierzy transformacji $Q^{\{i\}}$ tak, aby elementy nowej macierzy:

$$A^{\{i+1\}} = Q^{\{i\}T} \cdot A^{\{i\}} \cdot Q^{\{i\}} \quad (8)$$

spełniały warunek:

$$a_{pq}^{\{i+1\}} = a_{qp}^{\{i+1\}} = 0 \quad , \quad (9)$$

i wyznaczenie elementów nowej macierzy $A^{\{i+1\}}$. Jak łatwo sprawdzić, jeżeli macierz $Q^{\{i\}}$ przyjmiemy jako macierz jednostkową, w której zmieniono jedynie elementy:

$$\begin{aligned} q_{pp} &= q_{qq} = c \\ q_{pq} &= s \\ q_{qp} &= -s \end{aligned} \quad , \quad (10)$$

czyli ostateczna macierz będzie miała postać:

$$Q^{(i)} = \begin{matrix} & & \begin{matrix} p & q \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & \cdots & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ c \\ \vdots \\ -s \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & \cdots & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ s \\ \vdots \\ c \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} & \cdots & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{matrix} \end{matrix} \quad , \quad (11)$$

to spełnienie warunku ortogonalności $Q^T \cdot Q = I$ jest równoznaczne z zażądaniem aby wielkości oznaczone jako c i s spełniały zależność:

$$c^2 + s^2 = 1 \quad . \quad (12)$$

Warunek ten jest jednocześnie warunkiem wystarczającym ortogonalności macierzy Q .

Jak łatwo się przekonać, w trakcie transformacji (8) zmieniają się jedynie elementy macierzy A należące do wierszy i kolumn opatrzonych wskaźnikami p i q . Odpowiednie wzory transformacyjne mają postać:

$$\begin{aligned} a_{pp}^{(i+1)} &= c^2 \cdot a_{pp}^{(i)} + s^2 \cdot a_{qq}^{(i)} - 2 \cdot s \cdot c \cdot a_{pq}^{(i)} \\ a_{qq}^{(i+1)} &= s^2 \cdot a_{pp}^{(i)} + c^2 \cdot a_{qq}^{(i)} + 2 \cdot s \cdot c \cdot a_{pq}^{(i)} \\ a_{pq}^{(i+1)} &= (c^2 - s^2) \cdot a_{pq}^{(i)} + c \cdot s \cdot (a_{pp}^{(i)} - a_{qq}^{(i)}) \end{aligned} \quad , \quad (13)$$

$$\begin{aligned} a_{rp}^{(i+1)} &= c \cdot a_{rp}^{(i)} - s \cdot a_{rq}^{(i)} \\ a_{rq}^{(i+1)} &= s \cdot a_{rp}^{(i)} + c \cdot a_{rq}^{(i)} \\ a_{rp}^{(i+1)} &= c \cdot a_{pr}^{(i)} - s \cdot a_{qr}^{(i)} \\ a_{rq}^{(i+1)} &= s \cdot a_{pr}^{(i)} + c \cdot a_{qr}^{(i)} \end{aligned} \quad r \neq p, r \neq q \quad , \quad (14)$$

i można je wyprowadzić na przykład przez bezpośrednie wykonanie operacji macierzowych występujących w (8).

Warunek (9) w połączeniu z równaniem (13)³ służy do wyznaczenia c i s dla bieżącej iteracji. A mianowicie, ponieważ:

$$(c^2 - s^2) \cdot a_{pq}^{(i)} + c \cdot s \cdot (a_{pp}^{(i)} - a_{qq}^{(i)}) = 0 \quad (15)$$

jest równoważne:

$$\eta = \frac{c^2 - s^2}{2 \cdot c \cdot s} = \frac{a_{qq}^{(i)} - a_{pp}^{(i)}}{2 \cdot a_{pq}^{(i)}} \quad , \quad (16)$$

oznaczonemu η , przy podstawieniu

$$t = \frac{s}{c} \quad (17)$$

równanie (16) przechodzi w:

$$t^2 + 2 \cdot \eta \cdot t - 1 = 0 \quad , \quad (18)$$

czyli zwykle równanie kwadratowe ze względu na pomocniczą zmienną t . Pierwiastki tego równania można wyznaczyć posługując się dobrze znanymi wzorami, jednak, ze względu na poprawę stabilności numerycznej rozwiązania, do wyznaczenia mniejszego z nich korzystniej jest stosować formułę:

$$t = \frac{\operatorname{sgn}(\eta)}{|\eta| + \sqrt{\eta^2 + 1}} \quad . \quad (19)$$

Gdyby jednakże η było tak duże, że η^2 powodowałoby wystąpienie błędu nadmiaru w trakcie wykonywania obliczeń, należy zastosować formułę:

$$t = \frac{1}{2 \cdot \eta} \quad . \quad (20)$$

Po wyznaczeniu wartości zmiennej pomocniczej t powracamy do wyjściowych niewiadomych c i s , korzystając z zależności (12) i (17):

$$c = \frac{1}{\sqrt{t^2 + 1}} \quad . \quad (21)$$

$$s = t \cdot c$$

3. Obliczenie macierzy wektorów własnych na podstawie zależności:

$$W^{\{i+1\}} = W^{\{i\}} \cdot Q^{\{i\}} \quad , \quad (22)$$

przy czym początkową macierzą $W^{\{0\}}$ jest macierz jednostkowa. Stosowne wzory transformacyjne przyjmą postać:

$$\begin{aligned} w_{rp}^{\{i+1\}} &= c \cdot w_{rp}^{\{i\}} - s \cdot w_{rq}^{\{i\}} \\ w_{rq}^{\{i+1\}} &= s \cdot w_{rp}^{\{i\}} + c \cdot w_{rq}^{\{i\}} \end{aligned} \quad r = 1, 2, \dots, n \quad , \quad (23)$$

która wynika z faktu, że w kolejnych iteracjach zmieniają się wyłącznie kolumny p i q macierzy W .

4. Sprawdzenie warunku zakończenia obliczeń:

$$\frac{sp^{\{i+1\}}}{sn^{\{i+1\}}} < \varepsilon \quad , \quad (24)$$

w którym licznik i mianownik ułamka są odpowiednio równe:

$$\begin{aligned} sp^{\{i+1\}} &= \max_{\substack{i, j=1, 2, \dots, n \\ i \neq j}} |a_{ij}^{\{i+1\}}| \\ sn^{\{i+1\}} &= \max_{i=1, 2, \dots, n} |a_{ii}^{\{i+1\}}| \end{aligned} \quad (25)$$

dla normy maksimum, lub:

$$\begin{aligned} sp^{\{i+1\}} &= \sqrt{\frac{1}{n^2 - n} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \sum_{j=1}^n (a_{ij}^{\{i+1\}})^2} \\ sn^{\{i+1\}} &= \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (a_{ii}^{\{i+1\}})^2} \end{aligned} \quad (26)$$

dla normy średniokwadratowej.

Jeżeli warunek (24) jest spełniony dla narzuconej przez użytkownika dokładności ε , to kończymy obliczenia, w przeciwnym przypadku kontynuujemy pracę poczynając od wyznaczenia nowego elementu wiodącego $a_{pq}^{\{i+1\}}$ (7). Tak obrana metoda postępowania będzie zbieżna, ponieważ jeśli obliczymy sumę kwadratów elementów macierzy $A^{\{i\}}$ leżących poza przekątną główną i oznaczymy ją przez $S^{\{i\}}$:

$$S^{\{i\}} = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \sum_{j=1}^n (a_{ij}^{\{i\}})^2, \quad (27)$$

to wprost z (14) wynika, że:

$$S^{\{i+1\}} = S^{\{i\}} - 2 \cdot (a_{pq}^{\{i\}})^2, \quad (28)$$

czyli, że licznik ułamka we wzorze (24) będzie monotonicznie malał do zera w kolejnych iteracjach, a więc dla dowolnie małego dodatniego ε warunek (24) zostanie spełniony po skończonej liczbie iteracji.

Metoda Jacobiego jest efektywna dla macierzy A o niewielkich rozmiarach (rzędu 10). Do prowadzenia obliczeń na dużych macierzach należy stosować inne, bardziej efektywne metody, np. metodę Hausholdera lub Lanczosa aby doprowadzić macierz wyjściową do postaci trójdiagonalnej a następnie metodę rozkładu $Q \cdot R$ do wyznaczenia wartości i wektorów własnych tak zredukowanej macierzy.

Algorytm postępowania przedstawia się następująco:

1. Wybrać element wiodący (czyli wyznaczyć p i q) (7);
2. Obliczyć η i t (16), (19);
3. Obliczyć c i s (21);
4. Wyznaczyć $A^{\{i+1\}}$ (8) lub (13), (14);
5. Wyznaczyć $W^{\{i+1\}}$ (22) lub (23);
6. Sprawdzić warunek (24).

W zależności od wyniku sprawdzenia albo należy wrócić do 1., albo zakończyć pracę.

Dla lepszej ilustracji sposobu postępowania przedstawimy go na przykładzie obliczania wszystkich wartości własnych i odpowiadających im wektorów własnych macierzy $A_{[4 \times 4]}$ z dokładnością $\varepsilon = 0,0001$:

$$A = A^{\{0\}} = \begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 & 4 \\ -2 & -6 & 2 & -1 \\ 1 & 2 & -2 & 5 \\ 4 & -1 & 5 & -7 \end{bmatrix}. \quad (29)$$

Iteracja pierwsza:

1. Element wiodący (największy co do modułu element macierzy $A^{(0)}$ spoza przekątnej głównej)
 $p = 3, q = 4$.
2. Współczynniki η i t :

$$\begin{aligned} a_{33}^{(0)} &= -2, a_{34}^{(0)} = 5, a_{44}^{(0)} = -7 \\ \eta &= \frac{a_{44}^{(0)} - a_{33}^{(0)}}{2 \cdot a_{34}^{(0)}} = \frac{-7 + 2}{2 \cdot 5} = -0,500000 \\ t &= \frac{\text{sgn}(\eta)}{|\eta| + \sqrt{\eta^2 + 1}} = \frac{\text{sgn}(-0,500000)}{|-0,500000| + \sqrt{(-0,500000)^2 + 1}} = -0,618034 \end{aligned} \quad (30)$$

3. Współczynniki c i s :

$$\begin{aligned} c &= \frac{1}{\sqrt{t^2 + 1}} = \frac{1}{\sqrt{(-0,618034)^2 + 1}} = 0,850651 \\ s &= t \cdot c = -0,618034 \cdot 0,850651 = -0,525731 \end{aligned} \quad (31)$$

4. Macierz $A^{(1)}$:

$$Q^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & s \\ 0 & 0 & -s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,851 & -0,526 \\ 0,000 & 0,000 & 0,526 & 0,851 \end{bmatrix} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} A^{(1)} &= Q^{(0)T} \cdot A^{(0)} \cdot Q^{(0)} = \\ &= \begin{bmatrix} 1,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,851 & -0,526 \\ 0,000 & 0,000 & 0,526 & 0,851 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 & 4 \\ -2 & -6 & 2 & -1 \\ 1 & 2 & -7 & 5 \\ 4 & -1 & 5 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,851 & 0,851 \\ 0,000 & 0,000 & -0,526 & 0,526 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3,000 & -2,000 & 2,954 & 2,877 \\ -2,000 & -6,000 & 1,176 & -1,902 \\ 2,954 & 1,176 & 1,090 & 0,000 \\ 2,877 & -1,902 & 0,000 & -10,090 \end{bmatrix} \quad (33) \end{aligned}$$

5. Macierz $W^{(1)}$:

$$\begin{aligned} W^{(1)} &= W^{(0)} \cdot Q^{(0)} = \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,851 & -0,526 \\ 0,000 & 0,000 & 0,526 & 0,851 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,851 & -0,526 \\ 0,000 & 0,000 & 0,526 & 0,851 \end{bmatrix} \quad (34) \end{aligned}$$

6. Warunek zakończenia obliczeń (w normie maksimum):

$$sp^{(1)} = \max_{\substack{i,j=1,2,3,4 \\ i \neq j}} |a_{ij}^{(1)}| = 2,953575 \quad (35)$$

$$sn^{(1)} = \max_{i=1,2,3,4} |a_{ii}^{(1)}| = 10,090170$$

$$\frac{sp^{(1)}}{sn^{(1)}} = \frac{2,953575}{10,090170} = 0,292718 > \varepsilon \quad (36)$$

czyli konieczne jest wykonanie następnej iteracji.

Iteracja druga:

1. Element wiodący (największy co do modułu element macierzy $A^{\{1\}}$ spoza przekątnej głównej)
 $p=1, q=3$.
2. Współczynniki η i t :

$$a_{11}^{\{1\}} = 3, a_{13}^{\{1\}} = 2,953575, a_{33}^{\{1\}} = 1,090170$$

$$\eta = \frac{a_{33}^{\{1\}} - a_{11}^{\{1\}}}{2 \cdot a_{13}^{\{1\}}} = \frac{1,090170 - 3}{2 \cdot 2,953575} = -0,323308 \quad (37)$$

$$t = \frac{\text{sgn}(\eta)}{|\eta| + \sqrt{\eta^2 + 1}} = \frac{\text{sgn}(-0,323308)}{|-0,323308| + \sqrt{(-0,323308)^2 + 1}} = -0,727657$$

3. Współczynniki c i s :

$$c = \frac{1}{\sqrt{t^2 + 1}} = \frac{1}{\sqrt{(-0,727657)^2 + 1}} = 0,808588 \quad (38)$$

$$s = t \cdot c = -0,727657 \cdot 0,808588 = -0,588375$$

4. Macierz $A^{\{2\}}$:

$$Q^{\{1\}} = \begin{bmatrix} c & 0 & s & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -s & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,809 & 0,000 & -0,588 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,588 & 0,000 & 0,809 & 0,000 \\ 0 & 0,000 & 0,000 & 1,000 \end{bmatrix} \quad (39)$$

$$A^{\{2\}} = Q^{\{1\}T} \cdot A^{\{1\}} \cdot Q^{\{1\}} =$$

$$= \begin{bmatrix} 0,809 & 0,000 & -0,588 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,588 & 0,000 & 0,809 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 1,000 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3,000 & -2,000 & 2,954 & 2,877 \\ -2,000 & -6,000 & 1,176 & -1,902 \\ 2,954 & 1,176 & 1,090 & 0,000 \\ 2,877 & -1,902 & 0,000 & -10,090 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,809 & 0,000 & 0,588 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ -0,588 & 0,000 & 0,809 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 1,000 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5,149 & -0,926 & 0,000 & 2,326 \\ -0,926 & -6,000 & 2,127 & -1,902 \\ 0,000 & 2,127 & -1,059 & -1,693 \\ 2,326 & -1,902 & -1,693 & -10,090 \end{bmatrix} \quad (40)$$

5. Macierz $W^{\{2\}}$:

$$W^{\{2\}} = W^{\{1\}} \cdot Q^{\{1\}} =$$

$$= \begin{bmatrix} 1,000 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,851 & -0,526 \\ 0,000 & 0,000 & 0,526 & 0,851 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,809 & 0,000 & -0,588 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,588 & 0,000 & 0,809 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & 1,000 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,809 & 0,000 & -0,588 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,501 & 0,000 & 0,688 & -0,526 \\ 0,309 & 0,000 & 0,425 & 0,851 \end{bmatrix} \quad (41)$$

6. Warunek zakończenia obliczeń (w normie maksimum):

$$sp^{\{2\}} = \max_{\substack{i,j=1,2,3,4 \\ i \neq j}} |a_{ij}^{\{2\}}| = 2,326205 \quad (42)$$

$$sn^{\{2\}} = \max_{i=1,2,3,4} |a_{ii}^{\{2\}}| = 10,090170$$

$$\frac{sp^{\{2\}}}{sn^{\{2\}}} = \frac{2,326205}{10,090170} = 0,230542 > \varepsilon \quad (43)$$

czyli dalej konieczne jest wykonanie następnej iteracji.

Iteracja trzecia:

1. Element wiodący (największy co do modułu element macierzy $A^{(2)}$ spoza przekątnej głównej)
 $p=1, q=4$.
2. Współczynniki η i t :

$$a_{11}^{(2)} = 5,149190, a_{14}^{(2)} = 2,326205, a_{44}^{(2)} = -10,090170$$

$$\eta = \frac{a_{44}^{(2)} - a_{11}^{(2)}}{2 \cdot a_{14}^{(2)}} = \frac{-10,090170 - 5,149190}{2 \cdot 2,326205} = -3,275584 \quad (44)$$

$$t = \frac{\text{sgn}(\eta)}{|\eta| + \sqrt{\eta^2 + 1}} = \frac{\text{sgn}(-3,275584)}{|-3,275584| + \sqrt{(-3,275584)^2 + 1}} = -0,149245$$

3. Współczynniki c i s :

$$c = \frac{1}{\sqrt{t^2 + 1}} = \frac{1}{\sqrt{(-0,149245)^2 + 1}} = 0,989046 \quad (45)$$

$$s = t \cdot c = -0,149245 \cdot 0,989046 = -0,147610$$

4. Macierz $A^{(3)}$:

$$Q^{(2)} = \begin{bmatrix} c & 0 & 0 & s \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -s & 0 & 0 & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,989 & 0,000 & 0,000 & -0,148 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 1,000 & 0,000 \\ 0,148 & 0,000 & 0,000 & 0,989 \end{bmatrix} \quad (46)$$

$$A^{(3)} = Q^{(2)T} \cdot A^{(2)} \cdot Q^{(2)} =$$

$$= \begin{bmatrix} 0,989 & 0,000 & 0,000 & -0,148 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 1,000 & 0,000 \\ 0,148 & 0,000 & 0,000 & 0,989 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 5,149 & -0,926 & 0,000 & 2,326 \\ -0,926 & -6,000 & 2,127 & -1,902 \\ 0,000 & 2,127 & -1,059 & -1,693 \\ 2,326 & -1,902 & -1,693 & -10,090 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,989 & 0,000 & 0,000 & 0,148 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 1,000 & 0,000 \\ -0,148 & 0,000 & 0,000 & 0,989 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5,496 & -1,196 & -0,250 & 0,000 \\ -1,196 & -6,000 & 2,127 & -1,745 \\ -0,250 & 2,127 & -1,059 & -1,674 \\ 0,000 & -1,745 & -1,674 & -10,437 \end{bmatrix} \quad (47)$$

5. Macierz $W^{(3)}$:

$$W^{(3)} = W^{(2)} \cdot Q^{(2)} =$$

$$= \begin{bmatrix} 0,809 & 0,000 & -0,588 & 0,000 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,501 & 0,000 & 0,688 & -0,526 \\ 0,309 & 0,000 & 0,425 & 0,851 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,989 & 0,000 & 0,000 & -0,148 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 1,000 & 0,000 \\ 0,148 & 0,000 & 0,000 & 0,989 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,800 & 0,000 & -0,588 & -0,119 \\ 0,000 & 1,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,417 & 0,000 & 0,688 & -0,594 \\ 0,432 & 0,000 & 0,425 & 0,796 \end{bmatrix} \quad (48)$$

6. Warunek zakończenia obliczeń (w normie maksimum):

$$sp^{(3)} = \max_{\substack{i,j=1,2,3,4 \\ i \neq j}} |a_{ij}^{(3)}| = 2,127302 \quad (49)$$

$$sn^{(3)} = \max_{i=1,2,3,4} |a_{ii}^{(3)}| = 10,437343$$

$$\frac{sp^{(3)}}{sn^{(3)}} = \frac{2,127302}{10,437343} = 0,203816 > \varepsilon \quad (50)$$

czyli dalej konieczne jest wykonanie następnej iteracji.

Ostatecznie po wykonaniu 11 iteracji otrzymujemy:

$$D \cong A^{\{11\}} = \begin{bmatrix} 5,661 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & -6,626 & 0,000 & -0,001 \\ 0,000 & 0,000 & 0,103 & 0,000 \\ 0,000 & -0,001 & 0,000 & -11,137 \end{bmatrix}, \quad (51)$$

$$W \cong W^{\{11\}} = \begin{bmatrix} 0,836 & 0,327 & -0,414 & -0,154 \\ -0,119 & 0,883 & 0,350 & 0,288 \\ 0,346 & -0,109 & 0,794 & -0,489 \\ 0,410 & -0,318 & 0,276 & 0,809 \end{bmatrix}, \quad (52)$$

i warunek zakończenia obliczeń:

$$sp^{\{11\}} = \max_{\substack{i,j=1,2,3,4 \\ i \neq j}} |a_{ij}^{\{11\}}| = 0,000265, \quad (53)$$

$$sn^{\{11\}} = \max_{i=1,2,3,4} |a_{ii}^{\{11\}}| = 11,137200$$

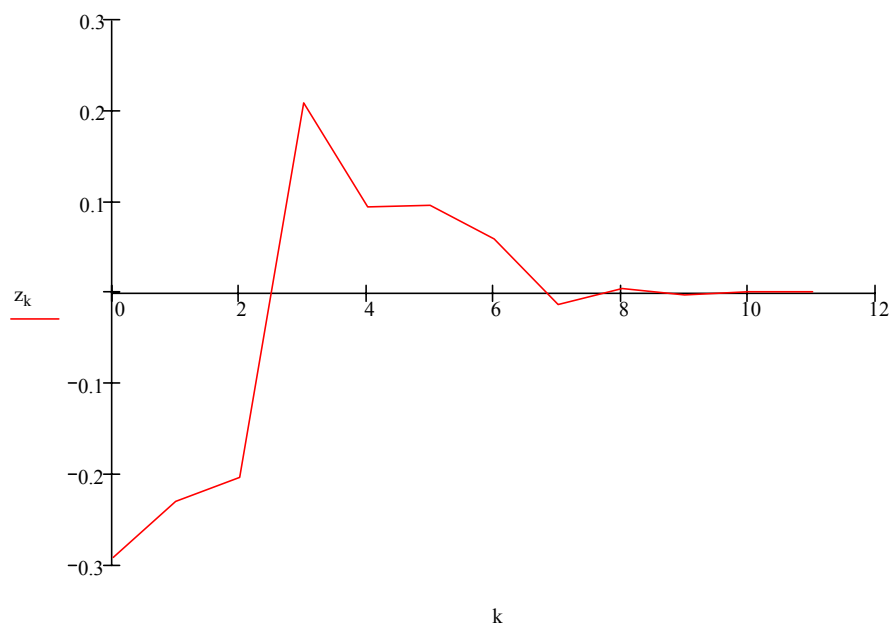
$$\frac{sp^{\{11\}}}{sn^{\{11\}}} = \frac{0,000265}{11,137200} = 0,000067 < \varepsilon, \quad (54)$$

podczas gdy wartości ścisłe macierzy D i W są równe odpowiednio:

$$D = A^{\{sc\}} = \begin{bmatrix} 5,661 & 0,000 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & -6,626 & 0,000 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,103 & 0,000 \\ 0,000 & 0,000 & 0,000 & -11,137 \end{bmatrix}, \quad (55)$$

$$W = W^{\{sc\}} = \begin{bmatrix} -0,836 & 0,327 & 0,414 & 0,154 \\ 0,119 & 0,883 & -0,350 & -0,288 \\ -0,346 & -0,109 & -0,794 & 0,489 \\ -0,410 & -0,318 & -0,276 & -0,809 \end{bmatrix}. \quad (56)$$

Jak widać przyjęcie warunku zakończenia obliczeń w normie maksimum z dopuszczalnym poziomem błęd $\varepsilon = 0,0001$ pozwoliło na wyznaczenie wszystkich wartości i wektorów własnych macierzy A z dokładnością co najmniej trzech cyfr znaczących.



Rys. 1. Błąd metody Jacobiego w normie maksimum (k – liczba iteracji).

Metoda potęgowa

Metoda potęgowa w wersji podstawowej służy do wyznaczenia maksymalnej co do modułu wartości własnej i odpowiadającego jej wektora własnego. Jeżeli jednak wykorzystamy fakty, że wartości własne macierzy odwrotnej są odwrotnościami wartości własnych macierzy danej oraz że modyfikacja macierzy polegająca na dodaniu do elementów jej przekątnej głównej pewnej liczby d powoduje przesunięcie wszystkich wartości własnych tej macierzy o tę samą liczbę d (*przesunięcie widma*), możemy przy pomocy metody potęgowej wyznaczyć wartość własną najbliższą dowolnej liczbie.

Metoda potęgowa polega na wykonaniu ciągu mnożeń przyjętego wektora startowego przez macierz, której dominującej wartości własnej i odpowiadającego wektora własnego poszukujemy. Procedura taka jest równoznaczna pomnożeniu wektora startowego przez macierz wyjściową podniesioną do potęgi równej liczbie iteracji. Wektor będący iloczynem zmierza wtedy do wektora odpowiadającego największej wartości własnej, samą wartość własną możemy natomiast obliczyć z wyrażenia zwanego ilorazem Rayleigha (4). Uzasadnienie poprawności metody jest następujące. Rozważmy dowolny wektor $X^{(0)}$ oraz ciąg operacji mnożenia tego wektora przez macierz $A_{[n \times n]}$:

$$\begin{aligned} X^{(1)} &= A \cdot X^{(0)} \\ X^{(2)} &= A \cdot X^{(1)} = A^2 \cdot X^{(0)} \\ &\vdots \\ X^{(k+1)} &= A \cdot X^{(k)} = A \cdot A \cdot \dots \cdot A \cdot X^{(0)} = A^{k+1} \cdot X^{(0)} \end{aligned} \quad (57)$$

Ponieważ każdy wektor w przestrzeni n wymiarowej można przedstawić jako kombinację liniową wektorów własnych naszej macierzy, to w szczególności:

$$X^{(0)} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \cdot V_{j|} \quad , \quad (58)$$

gdzie $V_{j|}$ oznacza j -ty wektor własny a α_j mnożnik. Przyjmijmy ponadto, dla prostoty zapisu, że wartości własne są uporządkowane w kolejności od największej do najmniejszej co do modułu (wskaźnik j). Podstawiając (58) do (57)³ otrzymujemy:

$$X^{(k+1)} = A^{k+1} \cdot \sum_{j=1}^n \alpha_j \cdot V_{j|} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \cdot A^{k+1} \cdot V_{j|} \quad . \quad (59)$$

Ponieważ, na mocy definicji problemu własnego, zachodzi związek:

$$A^{k+1} \cdot V_{j|} = \lambda_j^{k+1} \cdot V_{j|} \quad , \quad (60)$$

to ostatni człon wyrażenia (59) jest równy:

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j \cdot A^{k+1} \cdot V_{j|} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \cdot \lambda_j^{k+1} \cdot V_{j|} \quad , \quad (61)$$

co, po wyciągnięciu przed znak sumy dominującej wartości własnej ostatecznie prowadzi do następującej zależności, wiążącej wektor $X^{(k+1)}$ z wartościami i wektorami własnymi macierzy A :

$$X^{(k+1)} = \lambda_1^{k+1} \cdot \left[\sum_{j=1}^n \alpha_j \cdot \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^{k+1} \cdot V_{j|} \right] \quad . \quad (62)$$

Zgodnie z wcześniejszym założeniem λ_1 jest dominującą wartością własną, czyli zachodzi zależność:

$$\frac{\lambda_j}{\lambda_1} < 1 \text{ dla } j \neq 1, \quad (63)$$

a więc gdy $k \rightarrow \infty$ to $\left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1}\right)^{k+1} \rightarrow 0$. Jak z tego widać

$$\lim_{k \rightarrow \infty} X^{[k]} = V_1, \quad \lambda_1 = \frac{X_{skl}^{[k+1]}}{X_{skl}^{[k]}}. \quad (64)$$

We wzorze (64) symbol skl oznacza dowolnie wybraną składową wektora.

Ze względu na stabilność numeryczną procedury, po każdym kroku potęgowym (57) nowo uzyskany wektor $X^{[k+1]}$ normalizujemy, czyli zastępujemy wektorem $W^{[i+1]}$ o tym samym kierunku i zwrocie, ale długości równej 1, czyli $W^{[i+1]T} \cdot W^{[i+1]} = 1$ (gdyby tej operacji nie wykonać to długość wektora po kolejnych krokach albo rosła by do nieskończoności, jeżeli długość wektora startowego była większa od jedności, albo malała do zera w przeciwnym przypadku) a wartości własnej nie obliczamy wprost ze wzoru (64) ale z ilorazu Rayleigha:

$$\lambda_1^{[k]} = \frac{X^{[k]T} \cdot A \cdot X^{[k]}}{X^{[k]T} \cdot X^{[k]}} = W^{[k]T} \cdot X^{[k+1]}. \quad (65)$$

Oczywiście po każdej iteracji należy sprawdzić warunki zakończenia obliczeń w postaci błędu zbieżności wartości własnej i wektora własnego:

$$w_\lambda = \frac{|\lambda^{[k+1]} - \lambda^{[k]}|}{|\lambda^{[k+1]}|} < \varepsilon_\lambda, \quad (66)$$

$$w_v = \|W^{[k+1]} - W^{[k]}\| < \varepsilon_v,$$

Ponieważ tempo zbieżności wartości własnej jest znacznie wyższe niż tempo zbieżności wektora własnego, dobór wartości ε_λ i ε_v powinien być wykonywany rozważnie, zwłaszcza dla dużych macierzy. W szczególności należy się zastanowić, czy w dalszej analizie są nam potrzebne zarówno wartość jak i odpowiadający jej wektor własny, a jeżeli tak, to czy muszą być wyznaczone tak samo precyzyjnie.

Przy sprawdzaniu warunku (66)² należy mieć na uwadze fakt, że jeżeli dominująca wartość własna jest ujemna, to wektory będące kolejnymi przybliżeniami odpowiadającego jej wektora własnego co iteracja będą zmieniały zwrot na przeciwny.

Ostateczny algorytm metody wygląda następująco:

Wyznaczyć wektor startowy $X^{[0]}$ mając na względzie fakt, że jego dobór może mieć znaczący wpływ na liczbę wykonanych iteracji. Oczywiście, jak łatwo się domyślić, im wektor startowy jest bliższy poszukiwanemu wektorowi własnemu, tym mniej iteracji trzeba będzie wykonać;

1. Znormalizować wyznaczony wektor $W^{[k]} = \frac{X^{[k]}}{\sqrt{X^{[k]T} \cdot X^{[k]}}}$;
2. Wykonać krok potęgowy $X^{[k+1]} = A \cdot W^{[k]}$;
3. Obliczyć iloraz Rayleigha $\lambda^{[k+1]} = W^{[k]T} \cdot X^{[k+1]}$;

4. Sprawdzić warunek (66).

W zależności od wyniku sprawdzenia albo należy wrócić do 1., albo zakończyć pracę.

Dla lepszej ilustracji sposobu postępowania przedstawimy go na przykładzie obliczania dominującej wartości własnej i odpowiadającego jej wektora własnego macierzy $A_{[4 \times 4]}$ z poprzedniego przykładu (29) dokładnością $\varepsilon_\lambda = \varepsilon_v = 0,0001$. W tym celu przyjmijmy wektor początkowy $X_{[4]}^{(0)}$:

$$X^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (67)$$

Iteracja pierwsza:

1. Normalizacja:

$$W^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{X^{(0)T} \cdot X^{(0)}}} \cdot X^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{4}} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,500 \\ -0,500 \\ -0,500 \\ -0,500 \end{bmatrix}. \quad (68)$$

2. Krok potęgowy:

$$X^{(1)} = A \cdot W^{(0)} = \begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 & 4 \\ -2 & -6 & 2 & -1 \\ 1 & 2 & -2 & 5 \\ 4 & -1 & 5 & -7 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,500 \\ -0,500 \\ -0,500 \\ -0,500 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,000 \\ 1,500 \\ -2,000 \\ 3,500 \end{bmatrix}. \quad (69)$$

3. Iloraz Rayleigha:

$$\lambda^{(0)} = W^{(0)T} \cdot X^{(1)} = [0,500 \ -0,500 \ -0,500 \ -0,500] \cdot \begin{bmatrix} 0,000 \\ 1,500 \\ -2,000 \\ 3,500 \end{bmatrix} = -1,500000. \quad (70)$$

4. Warunki zakończenia obliczeń mogą być sprawdzone dopiero po drugiej iteracji, w takim razie powracamy do punktu 1. i kontynuujemy obliczenia.

Iteracja druga:

1. Normalizacja:

$$W^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{X^{(1)T} \cdot X^{(1)}}} \cdot X^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{18,5}} \cdot \begin{bmatrix} 0,000 \\ 1,500 \\ -2,000 \\ 3,500 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,000 \\ 0,349 \\ -0,465 \\ 0,814 \end{bmatrix}. \quad (71)$$

2. Krok potęgowy:

$$X^{(2)} = A \cdot W^{(1)} = \begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 & 4 \\ -2 & -6 & 2 & -1 \\ 1 & 2 & -2 & 5 \\ 4 & -1 & 5 & -7 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,000 \\ 0,349 \\ -0,465 \\ 0,814 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2,092 \\ -3,836 \\ 5,696 \\ -8,370 \end{bmatrix}. \quad (72)$$

3. Iloraz Rayleigha:

$$\lambda^{(1)} = W^{(1)T} \cdot X^{(2)} = [0,000 \ 0,349 \ -0,465 \ 0,814] \cdot \begin{bmatrix} 2,092 \\ -3,836 \\ 5,696 \\ -8,370 \end{bmatrix} = -10,797297. \quad (73)$$

4. Warunki zakończenia obliczeń:

$$w_\lambda = \frac{|\lambda^{1\{1\}} - \lambda^{0\{0\}}|}{|\lambda^{0\{0\}}|} = \frac{|-10,797297 + 1,500000|}{|-10,797297|} = 0,861076 > \varepsilon_\lambda$$

$$w_v = \|W^{1\{1\}} - W^{0\{0\}}\| = \left\| \begin{bmatrix} 0,000 \\ 0,349 \\ -0,465 \\ 0,814 \end{bmatrix} - (-1) \cdot \begin{bmatrix} 0,500 \\ -0,500 \\ -0,500 \\ -0,500 \end{bmatrix} \right\| = 1,141277 > \varepsilon_v$$
(74)

czyli konieczne jest wykonanie następnej iteracji.

Iteracja trzecia:

1. Normalizacja:

$$W^{2\{2\}} = \frac{1}{\sqrt{X^{2\{2\}T} \cdot X^{2\{2\}}}} \cdot X^{2\{2\}} = \frac{1}{\sqrt{11,026944}} \cdot \begin{bmatrix} 2,092 \\ -3,836 \\ 5,696 \\ -8,370 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,190 \\ -0,348 \\ 0,517 \\ -0,759 \end{bmatrix}$$
(75)

2. Krok potęgowy:

$$X^{3\{3\}} = A \cdot W^{2\{2\}} = \begin{bmatrix} 3 & -2 & 1 & 4 \\ -2 & -6 & 2 & -1 \\ 1 & 2 & -2 & 5 \\ 4 & -1 & 5 & -7 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,190 \\ -0,348 \\ 0,517 \\ -0,759 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1,255 \\ 3,500 \\ -5,334 \\ 9,003 \end{bmatrix}$$
(76)

3. Iloraz Rayleigha:

$$\lambda^{2\{2\}} = W^{2\{2\}T} \cdot X^{3\{3\}} = [0,190 \ -0,348 \ 0,517 \ -0,759] \cdot \begin{bmatrix} -1,255 \\ 3,500 \\ -5,334 \\ 9,003 \end{bmatrix} = -11,044677$$
(77)

4. Warunki zakończenia obliczeń:

$$w_\lambda = \frac{|\lambda^{2\{2\}} - \lambda^{1\{1\}}|}{|\lambda^{2\{2\}}|} = \frac{|-11,044677 + 10,797297|}{|-11,044677|} = 0,022398 > \varepsilon_\lambda$$

$$w_v = \|W^{2\{2\}} - W^{1\{1\}}\| = \left\| \begin{bmatrix} 0,190 \\ -0,348 \\ 0,517 \\ -0,759 \end{bmatrix} - (-1) \cdot \begin{bmatrix} 0,000 \\ 0,349 \\ -0,465 \\ 0,814 \end{bmatrix} \right\| = 0,204110 > \varepsilon_v$$
(78)

czyli dalej konieczne jest wykonanie następnej iteracji.

W toku dalszych obliczeń można się przekonać, że po ośmiu iteracjach:

$$w_\lambda = \frac{|\lambda^{8\{8\}} - \lambda^{7\{7\}}|}{|\lambda^{8\{8\}}|} = \frac{|-11,137020 + 11,136601|}{|-11,137020|} = 0,000038 < \varepsilon_\lambda$$

$$w_v = \|W^{8\{8\}} - W^{7\{7\}}\| = \left\| \begin{bmatrix} 0,154 \\ -0,291 \\ 0,490 \\ -0,808 \end{bmatrix} - (-1) \cdot \begin{bmatrix} -0,150 \\ 0,292 \\ -0,489 \\ 0,808 \end{bmatrix} \right\| = 0,003910 > \varepsilon_v$$
(79)

czyli został spełniony warunek (66)¹ (błąd zbieżności ze względu na wartość własną), a po 15 iteracjach:

$$w_\lambda = \frac{|\lambda^{\{15\}} - \lambda^{\{14\}}|}{|\lambda^{\{15\}}|} = \frac{|-11,137200 + 11,137200|}{|-11,137200|} = 0,00000001 < \varepsilon_\lambda$$

$$w_v = \|\mathcal{W}^{\{15\}} - \mathcal{W}^{\{14\}}\| = \left\| \begin{bmatrix} -0,154 \\ 0,288 \\ -0,489 \\ 0,809 \end{bmatrix} - (-1) \cdot \begin{bmatrix} 0,154 \\ -0,288 \\ 0,489 \\ -0,809 \end{bmatrix} \right\| = 0,000057 < \varepsilon_v \quad (80)$$

czyli został spełniony warunek (66)² (błąd zbieżności ze względu na wektor własny). Jak widać, uzyskanie takiej samej dokładności w przypadku wektora własnego, jak w przypadku wartości własnej wymaga wykonania około dwukrotnie większej liczby iteracji.

Efektywność (tempo zbieżności) metody potęgowej zależy od wartości ilorazu $|\lambda_2/\lambda_1|$, gdyż

$$X^{\{k+1\}} - X^{\{k\}} = \lambda_1^k \cdot \left[(\lambda_1 - 1) \cdot \alpha_1 \cdot V_{|1|} + \sum_{j=2}^n \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \cdot (\lambda_j - 1) \cdot \alpha_j \cdot V_{|j|} \right] = \lambda_1^k \cdot \left[c_1 \cdot V_{|1|} + \sum_{j=2}^n \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \cdot c_j \cdot V_{|j|} \right] \leq \quad (81)$$

$$\leq \lambda_1^k \cdot \left[c_1 \cdot V_{|1|} + \mu^k \cdot \left(\sum_{j=2}^n c_j \cdot V_{|j|} \right) \right], \quad \mu = \frac{\lambda_2}{\lambda_1}, \quad \mu \leq 1$$

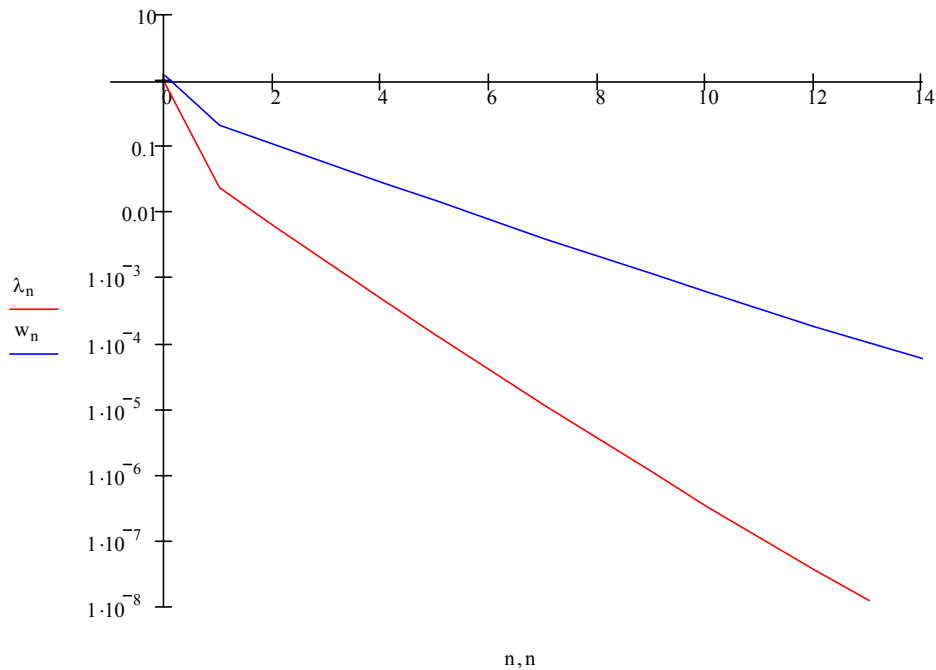
gdzie $c_j = (\lambda_j - 1) \cdot \alpha_j$, $j = 1, 2, \dots, n$ są stałymi współczynnikami rozkładu. Ze wzoru (81) wynika, że tempo, z jakim wektor X zmierza do wektora własnego $V_{|1|}$ jest szacowane od góry przez wartość tego ilorazu. Najgorsza sytuacja wystąpi wtedy, gdy iloraz jest równy jeden, czyli wartości te różnią się jedynie znakiem. W kolejnych iteracjach wystąpią oscylacje pomiędzy dwoma przeciwnymi wartościami λ bez szans na spełnienie warunku zakończenia obliczeń. Najlepsza sytuacja natomiast (a zatem również największe przyspieszenie obliczeń) nastąpi wtedy, gdy iloraz ten będzie miał największą możliwą dla danej macierzy wartość. Sytuacja taka pojawi się, gdy $|\lambda_2| = |\lambda_n|$. Można do niej doprowadzić przez odpowiednie przesunięcie widma wartości własnych wyjściowej macierzy o wartość

$$\lambda_{opt} = (\lambda_2 + \lambda_n)/2 \quad (82)$$

Należy w tym celu najpierw możliwie precyzyjnie oszacować wartości własne λ_2 i λ_n (na przykład korzystając z ciągów Sturma) a następnie przekształcić macierz $A_{[n \times n]}$ odejmując od wszystkich elementów jej przekątnej głównej składnik λ_{opt}

$$A' = A - \lambda_{opt} \cdot I \quad (83)$$

gdzie $I_{[n \times n]}$ oznacza macierz jednostkową, i dalsze obliczenia prowadzić na tak uzyskanej macierzy $A'_{[n \times n]}$, dla której będzie zachodził warunek $|\lambda'_2| = |\lambda'_n|$. Po zakończeniu iteracji należy oczywiście powrócić do wartości własnej macierzy wyjściowej, dodając do wyniku obliczeń metodą potęgową λ_{opt} . Wyznaczony w trakcie tych obliczeń wektor własny nie wymaga żadnych modyfikacji, gdyż przesunięcie widma nie ma wpływu na jego składowe.



Rys. 2. Zbieżność metody potęgowej dla dominującej wartości własnej (λ) i odpowiadającego jej wektora własnego (w) w kolejnych iteracjach (n), skala logarytmiczna.

Metoda iteracji odwrotnej

Metoda iteracji odwrotnej może być uważana za wariant metody potęgowej służący do wyznaczenia wartości własnej macierzy, najbliższej zeru. Podstawą merytoryczną tej metody jest cytowane wyżej twierdzenie, że wartości własne macierzy odwrotnej są odwrotnościami wartości własnych macierzy danej. Sposób postępowania jest podobny jak poprzednio, z jednym zastrzeżeniem dotyczącym kroku potęgowego.

W najprostszej postaci metody iteracji odwrotnej formalnie zastępujemy macierz A macierzą A^{-1} a dalej obliczenia prowadzimy jak w metodzie potęgowej. Jednak taki sposób postępowania jest mało efektywny numerycznie, gdyż złożoność obliczeniowa procedury odwracania macierzy jest duża. Jest jednak prosty sposób uniknięcia tej operacji. Wystarczy w tym celu w kroku potęgowym zamiast operacji mnożenia macierzy przez wektor:

$$X^{\{k+1\}} = A^{-1} \cdot X^{\{k\}} \quad , \quad (84)$$

rozwiązać układ liniowych równań algebraicznych:

$$A \cdot X^{\{k+1\}} = X^{\{k\}} \quad . \quad (85)$$

Aby rozwiązanie układu równań było efektywne należy zastosować jedną z metod opartych na dekompozycji macierzy (rozkład $L \cdot L^T$ jeżeli macierz jest dodatnio określona, rozkład $L \cdot U$ w przeciwnym przypadku), gdyż dekompozycji dokonujemy jednokrotnie, natomiast układ równań musimy rozwiązać w trakcie każdej iteracji. Taka procedura postępowania jest efektywna, gdy macierz A jest pełna lub prawie pełna. Jeżeli natomiast mamy do czynienia z macierzą A , która jest rzadka, korzystniejsze może okazać się zastosowanie procedury iteracyjnej rozwiązania układu liniowych równań algebraicznych. Ostatecznie, w przypadku metody iteracji odwrotnej algorytm postępowania przedstawia się następująco:

Wyznaczyć wektor startowy $X^{\{0\}}$;

1. Znormalizować wyznaczony wektor $W^{\{k\}} = \frac{X^{\{k\}}}{\sqrt{X^{\{k\}T} \cdot X^{\{k\}}}$;
2. Wykonać krok potęgowy $A \cdot X^{\{k+1\}} = W^{\{k\}}$ przez rozwiązanie układu liniowych równań algebraicznych;
3. Obliczyć iloraz Rayleigha $\lambda^{\{k+1\}} = W^{\{k\}T} \cdot X^{\{k+1\}}$;
4. Sprawdzić warunek (66).

W zależności od wyniku sprawdzenia albo należy wrócić do 1., albo zakończyć pracę.

Jeżeli metodę iteracji odwrotnej zastosujemy do macierzy po przesunięciu widma wartości własnych o liczbę d (83), uzyskamy zbieżność rozwiązania nie do najbliższej zera wartości własnej macierzy wyjściowej a do wartości własnej najbliższej tej zadanej liczbie. W ten sposób można, stosując wariant metody potęgowej, wyznaczyć dowolną wartość własną macierzy.

Uogólniony problem własny

Uogólnionym problemem własnym nazywamy zadanie w postaci:

$$A \cdot V = \lambda \cdot B \cdot V \quad . \quad (86)$$

Jeżeli wyznacznik macierzy B jest różny od zera zadanie takie można formalnie sprowadzić do standardowego problemu własnego przez obustronne pomnożenie przez macierz B^{-1} , co prowadzi do:

$$B^{-1} \cdot A \cdot V = \lambda \cdot V \quad . \quad (87)$$

Takie postępowanie ma jednak zasadniczą wadę spowodowaną numeryczną złożonością procedury (odwracanie macierzy), oraz możliwością utraty stabilności w trakcie obliczeń. Ponadto, jeżeli macierz B jest pasmowa (częsty przypadek) to macierz odwrotna do niej najczęściej taka nie jest, co w przypadku dużych zadań może być kłopotliwe.

Jeżeli macierz B jest symetryczna i dodatnio określona możliwy jest następujący sposób postępowania, polegający na zastosowaniu rozkładu $L \cdot L^T$:

$$B = L \cdot L^T \quad , \quad (88)$$

co po podstawieniu do (86) daje:

$$A \cdot X = \lambda \cdot L \cdot L^T \cdot X \quad , \quad (89)$$

a po lewostronnym pomnożeniu przez L^{-1} :

$$L^{-1} \cdot A \cdot X = \lambda \cdot L^{-1} \cdot L \cdot L^T \cdot X = \lambda \cdot L^T \cdot X \quad . \quad (90)$$

Jeżeli dokonamy teraz podstawienia:

$$L^T \cdot X = Y \quad , \quad \text{czyli} \quad X = L^{-T} \cdot Y \quad , \quad (91)$$

to problem (86) sprowadzimy do standardowego problemu własnego (1), z wartościami własnymi zachowanymi z zadania (86), ale zmienionymi wektorami własnymi:

$$\underbrace{L^{-1} \cdot A \cdot L^{-T}}_C \cdot Y = \lambda \cdot Y \quad , \quad (92)$$

który możemy rozwiązać na przykład jedną z przedstawionych powyżej metod. Znając wektory własne problemu (92) możemy w każdej chwili wrócić do wektorów własnych zadania wyjściowego (86), korzystając z zależności (91). Jeżeli natomiast w trakcie rozwiązywania zadania (86) meto-

dą potęgową przy uwzględnieniu zależności (88) chcemy uniknąć konieczności odwracania macierzy L i L^T możemy zastosować procedurę postępowania przedstawioną poniżej:

Dokonać rozkładu $L \cdot L^T$ macierzy B i przyjąć wektor startowy $Y^{(0)}$;

1. Znormalizować wyznaczony wektor $W^{(k)} = \frac{Y^{(k)}}{\sqrt{Y^{(k)T} \cdot Y^{(k)}}}$;
2. Obliczyć wektor $X^{(k)}$ rozwiązując układ liniowych równań algebraicznych $L^T \cdot X^{(k)} = W^{(k)}$;
3. Obliczyć wektor $Y^{(k+1)}$ rozwiązując układ liniowych równań algebraicznych $L \cdot Y^{(k+1)} = A \cdot X^{(k)}$, co jest równoznaczne wykonaniu kroku potęgowego;
4. Obliczyć iloraz Rayleigha $\lambda^{(k+1)} = W^{(k)T} \cdot Y^{(k+1)}$;
5. Sprawdzić warunek (66).

Dokładnie tak samo jak we wcześniej rozważanych przykładach, jeżeli warunek (66) został spełniony, kończymy obliczenia, w przeciwnym razie wracamy do 1.

W tym miejscu warto zwrócić uwagę na fakt, że w trakcie obliczeń (punkt 2.) w każdej iteracji jest znajdowany wektor własny oryginalnego problemu własnego (86), tak więc nie należy go obliczać ponownie na zakończenie pracy.

Przedstawiony powyżej sposób postępowania zastosujemy do wyznaczenia dominującej wartości własnej uogólnionego problemu własnego opisanego symetrycznymi macierzami $A_{[4 \times 4]}$ i $B_{[4 \times 4]}$, z dokładnością $\varepsilon_\lambda = \varepsilon_v = 0,0001$:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -3 & 2 \\ 1 & -3 & -6 & -2 \\ -3 & -6 & 4 & 1 \\ 2 & -2 & 1 & 3 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 2 & 8 \\ 2 & 10 & -5 & 10 \\ 2 & -5 & 9 & -2 \\ 8 & 10 & -2 & 46 \end{bmatrix}. \quad (93)$$

Operacje wstępne – rozkład macierzy B i wektor startowy $Y^{(0)}$:

$$B = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 2 & 8 \\ 2 & 10 & -5 & 10 \\ 2 & -5 & 9 & -2 \\ 8 & 10 & -2 & 46 \end{bmatrix} = L \cdot L^T = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -3 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -2 & 0 \\ 4 & -2 & 1 & -5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & -3 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -5 \end{bmatrix}, \quad Y^{(0)} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (94)$$

Iteracja pierwsza:

1. Normalizacja:

$$W^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{Y^{(0)T} \cdot Y^{(0)}}} \cdot Y^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{4}} \cdot \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,500 \\ 0,500 \\ -0,500 \\ 0,500 \end{bmatrix}. \quad (95)$$

2. Układ równań:

$$L^T \cdot X^{(0)} = W^{(0)} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & -3 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -5 \end{bmatrix} \cdot X^{(0)} = \begin{bmatrix} -0,500 \\ 0,500 \\ -0,500 \\ 0,500 \end{bmatrix} \Rightarrow X^{(0)} = \begin{bmatrix} -0,167 \\ 0,033 \\ 0,200 \\ -0,100 \end{bmatrix}. \quad (96)$$

3. Układ równań:

$$L \cdot Y^{\{1\}} = A \cdot X^{\{0\}} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -3 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -2 & 0 \\ 4 & -2 & 1 & -5 \end{bmatrix} \cdot Y^{\{1\}} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -3 & 2 \\ 1 & -3 & -6 & -2 \\ -3 & -6 & 4 & 1 \\ 2 & -2 & 1 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -0,167 \\ 0,033 \\ 0,200 \\ -0,100 \end{bmatrix} \Rightarrow Y^{\{1\}} = \begin{bmatrix} -0,550 \\ 0,239 \\ -0,536 \\ -0,543 \end{bmatrix} \quad (97)$$

4. Iloraz Rayleigha:

$$\lambda^{\{0\}} = W^{\{0\}T} \cdot Y^{\{1\}} = [-0,500 \quad 0,500 \quad -0,500 \quad 0,500] \cdot \begin{bmatrix} -0,550 \\ 0,239 \\ -0,536 \\ -0,543 \end{bmatrix} = 0,391111 \quad (98)$$

5. Warunki zakończenia obliczeń mogą być sprawdzone dopiero po drugiej iteracji, w takim razie powracamy do punktu 1. i kontynuujemy obliczenia.

Iteracja druga:

1. Normalizacja:

$$W^{\{1\}} = \frac{1}{\sqrt{Y^{\{1\}T} \cdot Y^{\{1\}}}} \cdot Y^{\{1\}} = \frac{1}{\sqrt{0,941591}} \cdot \begin{bmatrix} -0,550 \\ 0,239 \\ -0,536 \\ -0,543 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,567 \\ 0,246 \\ -0,552 \\ -0,559 \end{bmatrix} \quad (99)$$

2. Układ równań:

$$L^T \cdot X^{\{1\}} = W^{\{1\}} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & -3 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -5 \end{bmatrix} \cdot X^{\{1\}} = \begin{bmatrix} -0,567 \\ 0,246 \\ -0,552 \\ -0,559 \end{bmatrix} \Rightarrow X^{\{1\}} = \begin{bmatrix} -0,706 \\ 0,065 \\ 0,332 \\ 0,112 \end{bmatrix} \quad (100)$$

3. Układ równań:

$$L \cdot Y^{\{2\}} = A \cdot X^{\{1\}} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -3 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -2 & 0 \\ 4 & -2 & 1 & -5 \end{bmatrix} \cdot Y^{\{2\}} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -3 & 2 \\ 1 & -3 & -6 & -2 \\ -3 & -6 & 4 & 1 \\ 2 & -2 & 1 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -0,706 \\ 0,065 \\ 0,332 \\ 0,112 \end{bmatrix} \Rightarrow Y^{\{2\}} = \begin{bmatrix} -1,060 \\ 0,686 \\ -1,428 \\ -1,233 \end{bmatrix} \quad (101)$$

4. Iloraz Rayleigha:

$$\lambda^{\{1\}} = W^{\{1\}T} \cdot Y^{\{2\}} = [-0,567 \quad 0,246 \quad -0,552 \quad -0,559] \cdot \begin{bmatrix} -1,060 \\ 0,686 \\ -1,428 \\ -1,233 \end{bmatrix} = 2,248323 \quad (102)$$

5. Warunki zakończenia obliczeń:

$$w_\lambda = \frac{|\lambda^{\{1\}} - \lambda^{\{0\}}|}{|\lambda^{\{0\}}|} = \frac{|2,248323 - 0,391111|}{|0,391111|} = 0,826043 > \varepsilon_\lambda$$

$$w_v = \|W^{\{1\}} - W^{\{0\}}\| = \left\| \begin{bmatrix} -0,567 \\ 0,246 \\ -0,552 \\ -0,559 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0,500 \\ 0,500 \\ -0,500 \\ 0,500 \end{bmatrix} \right\| = 1,092649 > \varepsilon_v \quad (103)$$

czyli konieczne jest wykonanie następnej iteracji.

Iteracja trzecia:

1. Normalizacja:

$$W^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{Y^{(2)T} \cdot Y^{(2)}}} \cdot Y^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{5,153832}} \cdot \begin{bmatrix} -1,060 \\ 0,686 \\ -1,428 \\ -1,233 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,467 \\ 0,302 \\ -0,629 \\ -0,543 \end{bmatrix} . \quad (104)$$

2. Układ równań:

$$L^T \cdot X^{(2)} = W^{(2)} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & -3 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -5 \end{bmatrix} \cdot X^{(2)} = \begin{bmatrix} -0,467 \\ 0,302 \\ -0,629 \\ -0,543 \end{bmatrix} \Rightarrow X^{(2)} = \begin{bmatrix} -0,671 \\ 0,073 \\ 0,369 \\ 0,109 \end{bmatrix} . \quad (105)$$

3. Układ równań:

$$L \cdot Y^{(3)} = A \cdot X^{(2)} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -3 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -2 & 0 \\ 4 & -2 & 1 & -5 \end{bmatrix} \cdot Y^{(3)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -3 & 2 \\ 1 & -3 & -6 & -2 \\ -3 & -6 & 4 & 1 \\ 2 & -2 & 1 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -0,671 \\ 0,073 \\ 0,369 \\ 0,109 \end{bmatrix} \Rightarrow Y^{(3)} = \begin{bmatrix} -1,080 \\ 0,747 \\ -1,374 \\ -1,279 \end{bmatrix} . \quad (106)$$

4. Iloraz Rayleigha:

$$\lambda^{(2)} = W^{(2)T} \cdot Y^{(3)} = \begin{bmatrix} -0,467 & 0,302 & -0,629 & 0,543 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -1,080 \\ 0,747 \\ -1,374 \\ -1,279 \end{bmatrix} = 2,288566 . \quad (107)$$

5. Warunki zakończenia obliczeń:

$$w_\lambda = \frac{|\lambda^{(2)} - \lambda^{(1)}|}{|\lambda^{(1)}|} = \frac{|2,288566 - 2,248323|}{|2,288566|} = 0,017584 > \varepsilon_\lambda$$

$$w_v = \|W^{(2)} - W^{(1)}\| = \left\| \begin{bmatrix} -0,467 \\ 0,302 \\ -0,629 \\ -0,543 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0,567 \\ 0,246 \\ -0,551 \\ -0,559 \end{bmatrix} \right\| = 0,138843 > \varepsilon_v , \quad (108)$$

czyli konieczne jest wykonanie następnej iteracji.

W toku dalszych obliczeń można się przekonać, że po siedmiu iteracjach:

$$w_\lambda = \frac{|\lambda^{(7)} - \lambda^{(6)}|}{|\lambda^{(7)}|} = \frac{|2,290751 - 2,290603|}{|2,290751|} = 0,000065 < \varepsilon_\lambda$$

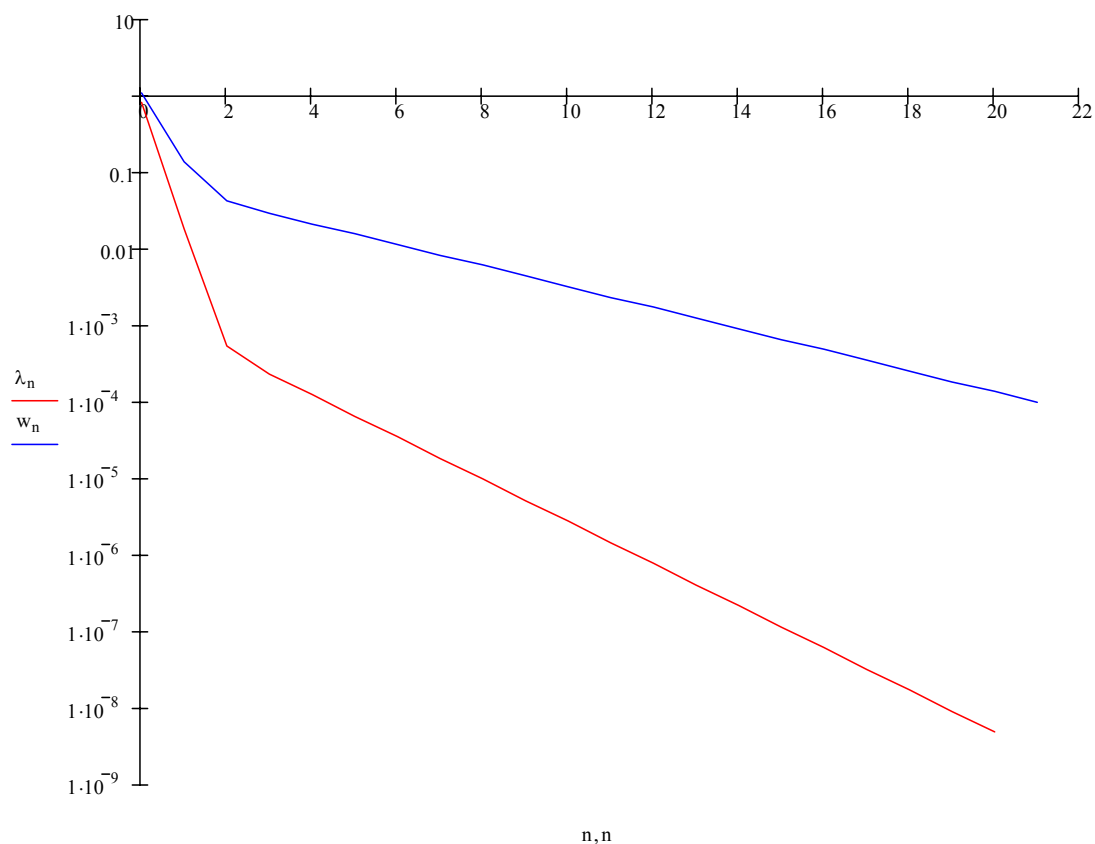
$$w_v = \|W^{(7)} - W^{(6)}\| = \left\| \begin{bmatrix} -0,467 \\ 0,319 \\ -0,609 \\ -0,556 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0,464 \\ 0,313 \\ -0,617 \\ -0,554 \end{bmatrix} \right\| = 0,011241 > \varepsilon_v , \quad (109)$$

czyli został spełniony warunek (66)¹ (błąd zbieżności ze względu na wartość własną), a po 22 iteracjach:

$$w_\lambda = \frac{|\lambda^{(22)} - \lambda^{(21)}|}{|\lambda^{(22)}|} = \frac{|2,290918 - 2,290918|}{|2,290918|} = 0,000000004 < \varepsilon_\lambda$$

$$w_v = \|W^{(22)} - W^{(21)}\| = \left\| \begin{bmatrix} -0,466 \\ 0,317 \\ -0,612 \\ -0,555 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0,466 \\ 0,317 \\ 0,612 \\ -0,555 \end{bmatrix} \right\| = 0,000097 < \varepsilon_v . \quad (110)$$

czyli został spełniony warunek $(66)^2$ (błąd zbieżności ze względu na wektor własny). Jak widać, uzyskanie takiej samej dokładności w przypadku wektora własnego, jak w przypadku wartości własnej w tym przypadku wymaga wykonania około trzykrotnie większej liczby iteracji.



Rys. 3 Zbieżność metody potęgowej dla dominującej wartości własnej (λ) i odpowiadającego jej wektora własnego (w) w kolejnych iteracjach (n) uogólnionego problemu własnego, skala logarytmiczna.