ISSN 2079–1836
2013, вип. 21

УДК 519.6

А. И. Косолап, д-р физ.-мат. наук, А. С. Перетятько

СОПРЯЖЕННЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ В ЗАДАЧАХ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ СИММЕТРИЧНЫХ МАТРИЦ

Рассмотрена задача поиска экстремальных собственных значений симметричных матриц, которая возникает во многих задачах вычислительной механики. Предложена модификация метода простой итерации для поиска собственных значений матриц, которая использует сопряженные направления и позволяет увеличить скорость сходимости данного метода. Сравнительные численные эксперименты подтверждают эффективность данной модификации метода простой итерации.

Ключевые слова: *симметричная матрица, собственные векторы, собственные значения, метод простой итерации, сопряженное направление.*

Введение. Задачам на собственные значения посвящено огромное число публикаций [1–7]. Это связано с тем, что многие задачи механики и других приложений приводят к необходимости нахождения собственных значений. В квантовой химии и молекулярной динамике взаимодействие электронов в молекулах и их движение определяется уравнением Шредингера, в котором возникает задача поиска собственных значений и собственных функций. В физике одной из задач волновой оптики является поиск решения так называемого векторного волнового уравнения для электрического поля, для решения которого требуется найти собственные числа [7]. Много задач на собственные значения возникает в технической механике – это решение проблем устойчивости механических систем, их колебаний и многие другие [1].

Проблема вычисления собственных значений является сложной для плохо обусловленных матриц и матриц большого размера. Существует много методов для нахождения собственных значений, каждый из которых имеет свои преимущества [4–6]. Детальный анализ численной сходимости методов приведен в книгах [4, 5].

В настоящее время лучшим методом для нахождения всех собственных значений матрицы A является QR-алгоритм [5, 6], однако его программная реализация является достаточно сложной. Кроме того, во многих практических задачах требуется найти только минимальное или максимальное собственное значение матрицы (эта задача называется частичной проблемой собственных значений). Так, для определения положительной определенности матрицы A достаточно знать ее минимальное собственное значение, а асимптотическая устойчивость решения линейной системы дифференциальных уравнений однозначно определяется максимальным собственным значением.

Для поиска экстремальных собственных значений матрицы чаще всего используют метод прямой или обратной итерации [6]. Будем далее рассматривать только симметричные матрицы. Сначала находят собственный вектор по итерационной процедуре $x^{k+1} = Ax^k, k = 0,1,\ldots$ На каждом шаге вектор x^{k+1} нормируется или делится на максимальную компоненту x^{k+1}. Вектор x^k стремится к собственному вектору *x*, когда $k \to \infty$, при соответствующем выборе начального вектора x^0. Тогда максимальное собственное число определяется по формуле $\lambda = x^T Ax / ||x||^2$, где $||\cdot||$ – означает евклидову норму.

Для нахождения минимального собственного значения матрицы A рассматривается итерационная процедура для обратной матрицы $x^{k+1} = A^{-1}x^k, k = 0,1,\ldots$ Метод простой итерации сходится глобально к собственному вектору с любой начальной точки, кроме точек гиперплоскости, для которой искомый собственный вектор является нормалью [6]. Однако сходимость метода простой итерации медленная [6]. Предлагались различные усовершенствования данного метода, но они лишь в некоторых случаях позволяют ускорить его сходимость [6]. В частности, используется смещение Релея $x^{k+1} = (A - \sigma_k I)^{-1} x^k$, где I – единичная матрица, а σ_k – отношение Релея

$$\sigma_k = \frac{x_k^T A x_k}{x_k^T x_k}.$$

В настоящей работе предлагается модификация метода простой итерации, использующая сопряженные направления, которая позволяет увеличить скорость сходимости к собственному вектору матрицы A в среднем в 1,5 раза (по результатам многочисленных экспериментов).

Постановка задачи нахождения экстремальных собственных значений симметричных матриц и метод ее решения. Необходимо найти такое число λ, которое удовлетворяет уравнению $Ax = \lambda x$, где A – симметричная матрица порядка n, а x – соответствующий собственный вектор. Для произвольной симметричной матрицы A существует n собственных значений, часть из которых могут быть кратными (т. е. их значения совпадают). Собственный вектор, соответствующий минимальному собственному значению, находим из решения задачи

$$\min\{x^T Ax \,|\, ||x||^2 = 1\}.$$

Решение этой задачи эквивалентно следующей:

$$\min\{x^T Ax + r(||x||^2 - 1) \,|\, ||x||^2 = 1\}. \quad (1)$$

Выберем такое значение $r > 0$, при котором матрица $A^* = A + rI$ будет положительно определенной (достаточно, чтобы диагональные элементы матрицы A^* были больше суммы модулей соответствующих недиагональных элементов).

Учитывая то, что собственный вектор достаточно найти с точностью до постоянного множителя, преобразуем задачу (1) к виду

$$\max\{||x||^2 | x^T A^* x = 1\}. \tag{2}$$

Для положительно определенной матрицы A^* задача (2) имеет простую геометрическую интерпретацию. В задаче (2) необходимо найти точку последнего касания шара $\{x \,|\, ||x||^2 = R^2\}$ границы эллипсоида $\{x \,|\, x^T A^* x = 1\}$ при увеличении радиуса шара R.

Таким образом, для проверки положительной определенности матрицы A достаточно найти собственный вектор матрицы A^*, соответствующий минимальному собственному значению A^*, и проверить условие $x^T Ax > 0$. Если оно выполняется, то матрица A – положительно определенная.

Для решения задачи (2) используем метод множителей Лагранжа, заменяя на каждой итерации ее целевую функцию линейной аппроксимацией:

$$\max\{(x^k)^T x \,|\, x^T A^* x = 1\}.$$

Это позволяет найти k-е приближение решения задачи (2) в виде

$$x^k = \frac{(A^*)^{-k} x^0}{\sqrt{x^0 (A^*)^{-(2k-1)} x^0}}.$$

Очевидно, что полученная процедура совпадает с методом обратной итерации для положительно определенной матрицы A^*. Для ускорения сходимости метода обратной итерации используем процедуру построения сопряженных направлений. Два вектора x и z – сопряженные, если $x^T A^* z = 0$. Теперь в методе обратной итерации вместо вектора x^{k+1} будем брать его коррекцию так, чтобы новый вектор равнялся $z^{k+1} = x^{k+1} - \alpha x^k$, где параметр α выбираем из условия, что векторы x^k и z^{k+1} – сопряженные. Это означает, что

$$(x^k)^T A^* z^{k+1} = (x^k)^T A^* (x^{k+1} - \alpha x^k) = (x^k)^T A^* x^{k+1} - \alpha (x^k)^T A^* x^k = 0,$$

откуда

$$\alpha = \frac{(x^k)^T A^* x^{k+1}}{(x^k)^T A^* x^k}.$$

Полагаем $x^{k+1}=z^{k+1}$ и процесс поиска собственного вектора методом обратной итерации продолжается. Искомый собственный вектор будет достигнут, если выполнится условие $\|x^{k+1}-x^k\|\le\varepsilon$ с заданной точностью ε. Сходимость сопряженного метода следует непосредственно из сходимости метода простой итерации. Заметим, что значение

$$\alpha=\beta\frac{(x^k)^T A^* x^{k+1}}{(x^k)^T A^* x^k},$$

где $\beta\in(0,1]$, сохраняет сопряженность векторов x^k и z^{k+1}. Таким образом, β – регулируемый параметр и скорость сходимости рассмотренного метода иногда зависит от выбора соответствующего значения параметра β. Для сокращения вычислений в формуле для параметра α заменим матрицу A^* на обратную. Тогда

$$\alpha=\beta\frac{(x^k)^T (A^*)^{-1} x^{k+1}}{(x^k)^T (A^*)^{-1} x^k}=\beta\frac{\|x^{k+1}\|^2}{(x^k)^T x^{k+1}}.$$

Это позволяет увеличить скорость и точность вычисления собственного значения (рекомендуется выбирать $\beta=0{,}5$).

После того, как собственный вектор x^* найден, минимальное собственное значение находим по формуле

$$\lambda_{\min}=\frac{x^{*T}Ax^*}{x^{*T}x^*}.$$

Сходимость рассмотренного метода к собственному вектору, соответствующему минимальному собственному значению, зависит от выбора начального вектора. В качестве начального приближения x^0 достаточно взять точку (вектор) не ортогональную искомому собственному вектору. Этому условию удовлетворяет точка касания эллипсоида грани описанного прямоугольного параллелепипеда

$$x^0=\frac{(A^*)^{-1}e}{\sqrt{a_{ii}^{-1}}},$$

где $e=(1,\ldots,1)$, а a_{ii}^{-1} – i-й диагональный элемент матрицы $(A^*)^{-1}$, значение i выбирается из условия максимума $\|x^0\|$.

Сравнительные численные эксперименты. Средствами VBA Excel были разработаны программы метода обратной итерации, метода итерации с отношением Релея и данной модификации, использующей сопряженные направления (соответственно PI, PIR, PIM). Эксперименты проводились для матриц различного размера со сложной структурой на компьютере с двухъядерным процессором Intel PentiumCore i5 с частотой 2,5 $ГГц$ при точности вычислений 10^{-8}. Симметричные матрицы преобразовывались к положительно определенным, для которых находился собственный вектор, соответствующий минимальному собственному значению. Максимальное количество итераций для каждого метода выбиралось одно и тоже. Приведены результаты расчетов минимального собственного значения для сложных матриц.

Пример 1. Ниже приведена матрица размерностью 7×7 (табл. 1), для которой методом QR было найдено минимальное собственное значение 8,09842422, методом PI – 8,0986312, методом PIR – 8,1003712 и методом PIM – 8,0982538 при одних и тех же начальных данных.

Таблица 1 – **Положительно определенная матрица** 7×7

9,100007	1,000006	2,000008	3,000005	-7,2E-07	1	1,2E-07
1,000006	9,100084	2,0016	3,000055	0,000527	1,000019	0,000138
2,000008	2,0016	12,09995	6,000524	-3,5E-05	2,00014	-8,8E-06
3,000005	3,000055	6,000524	17,10001	0,000175	2,999997	4,67E-05
-7,2E-07	0,000527	-3,5E-05	0,000175	8,1	4,83E-05	8,68E-07
1	1,000019	2,00014	2,999997	4,83E-05	9,099999	1,3E-05
1,2E-07	0,000138	-8,8E-06	4,67E-05	8,68E-07	1,3E-05	8,1

Полученные результаты показывают преимущество метода, использующего сопряженные направления.

Пример 2. Ниже приведена матрица размерностью 6×6 (табл. 2), для которой методом QR было найдено минимальное собственное значение 1,000963, методом PI – 1,00104, методом PIR – 1,012069 и методом PIM – 1,000963.

Таблица 2 – **Положительно определенная матрица** 6×6

1,115400	-0,070875	0,114563	0,110953	0,071878	0,208257
-0,070875	1,151974	0,021453	-0,151891	-0,078569	-0,185497
0,114563	0,021453	1,243594	-0,007967	0,050359	0,115380
0,110953	-0,151891	-0,007967	1,268667	0,059772	0,361045
0,071878	-0,078569	0,050359	0,059772	1,081128	0,103063
0,208257	-0,185497	0,115380	0,361045	0,103063	1,557112

Пример 3. Ниже приведена матрица размерностью 5×5 (табл. 3), для которой методом QR было найдено минимальное собственное значение 1,441702, методом PI – 1,441837, методом PIR – 1,442999 и методом PIM – 1,441697.

Таблица 3 – **Положительно определенная матрица** 5×5

2	-7,85E-04	0	-0,34151	-0,28281
-7,85E-04	1,641704	0	1,30E-03	0
0	0	1,441704	0	1,30E-03
-0,34151	1,30E-03	0	1,957557	0
-0,28281	0	1,30E-03	0	1,957557

Пример 4. Ниже приведена матрица размерностью 11×11 (табл. 4), для которой методом QR было найдено минимальное собственное значение 4,98902, методом PI – 4,98911, методом PIR – 4,999594 и методом PIM – 4,98902.

Таблица 4 – **Положительно определенная матрица** 11×11

6	0	0	0,25	0,433	1	0	1,25	0,433	1	0,866
0	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	5	0	0	0	0	0	0	0	0
0,25	0	0	5,0625	0,10825	0,25	0	0,3125	0,10825	0,25	0,2165
0,433	0	0	0,10825	5,187489	0,433	0	0,54125	0,187489	0,433	0,374978
1	0	0	0,25	0,433	6	0	1,25	0,433	1	0,866
0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	0
1,25	0	0	0,3125	0,54125	1,25	0	6,5625	0,54125	1,25	1,0825
0,433	0	0	0,10825	0,187489	0,433	0	0,54125	5,187489	0,433	0,374978
1	0	0	0,25	0,433	1	0	1,25	0,433	6	0,877
0,866	0	0	0,2165	0,374978	0,866	0	1,0825	0,374978	0,877	5,749956

Пример 5. Ниже приведена матрица размерностью 9×9 (табл. 5), для которой методом QR было найдено минимальное собственное значение 0,425982, методом PI – 0,425714, методом PIR – 0,427053 и методом PIM – 0,425668.

Таблица 5 – **Положительно определенная матрица** 9×9

1,00E+00	-1,60E-04	0,000	-0,3237	-2,81E-01	1,40E-04	8,06E-05	-0,24981	-1,44E-01
-1,60E-04	0,427052	0,000	-1,83E-04	0	1,48E-05	0	0	0
0	0	0,427	0,00E+00	-0,001	0,00E+00	-0,001	0	0
-0,3237	-1,83E-04	0,000	0,909604	0	0	0	0,16454	0
-0,28138	0	-0,001	0	0,909604	0	0	0	0,16454
1,40E-04	1,48E-05	0,000	0	0	0,426452	0,00E+00	-8,97E-05	0
8,06E-05	0,00E+00	-0,001	0	0	0	0,426452	0,00E+00	-8,97E-05
-0,24981	0	0,000	0,16454	0	-8,97E-05	0	0,595331	0
-0,14422	0	0,000	0	0,16454	0	-8,97E-05	0	0,595331

Преимущество метода PIM наблюдалось и в многочисленных других экспериментах со сложными матрицами.

Выводы. Предложена новая модификация метода простой итерации для нахождения экстремальных собственных значений симметричных матриц, использующая сопряженные направления. Сравнительные численные эксперименты показали более быструю сходимость нового метода. Это позволит ускорить решение многих прикладных задач в вычислительной механике и в других приложениях.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. ***Деммель Дж.*** Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения / Дж. Деммель; пер. с англ. Х. Д. Икрамова. – М. : Мир, 2001. – 430 с.
2. ***Коллатц Л.*** Задачи на собственные значения. С техническими приложениями / Л. Коллатц; пер. с нем. В. В. Никольського. – М. : Наука, 1968. – 504 с.
3. ***Ортега Дж.*** Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений / Дж. Ортега, У. Пул; пер. с англ. Н. Б. Конюховой; под ред. А. А. Абрамова. – М. : Наука, 1986. – 288 с.
4. ***Парлетт Б.*** Симметричная проблема собственных значений. Численные методы / Б. Парлетт; пер. с англ. Х. Д. Икрамова и Ю. А. Кузнецова. – М. : Мир, 1983. – 384 с.
5. ***Уилкинсон Дж. Х.*** Алгебраическая проблема собственных значений / Дж. Х. Уилкинсон. – М. : Наука, 1970. – 564 с.
6. ***Harrar D. L.*** Parallel solution of some large-scale eigenvalue problems arising in chemistry and physics / D. L. Harrar, M. R. Osborne // Applied Parallel Computing Large Scale Scientific and Industrial Problems. – 1998. – Vol. 1541. – P. 216–223.
7. ***Prodi G.*** Eigenvalues of non-linear problems / G. Prodi (ed.). – Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. – 238 p.

А. І. Косолап, д-р фіз.-мат. наук, А. С. Перетятько

СПРЯЖЕНІ НАПРЯМКИ В ЗАДАЧАХ НА ВЛАСНІ ЗНАЧЕННЯ СИМЕТРИЧНИХ МАТРИЦЬ

Розглядається задача пошуку екстремальних власних значень симетричних матриць, яка виникає в багатьох задачах обчислювальної механіки. Пропонується модифікація методу простої ітерації для пошуку власних значень матриць, яка використовує спряжені напрямки, що дозволяє збільшити швидкість збігання даного методу. Порівняльні чисельні експерименти підтверджують ефективність даної модифікації методу простої ітерації.

Ключові слова: *симметрична матриця, власні вектори, власні значення, метод простої ітерації, спряжений напрямок.*

A. I. Kosolap, Professor, A. C. Peretyatko

THE CONJUGATE DIRECTIONS IN PROBLEMS ON EIGENVALUES OF SYMMETRIC MATRICES

The problem of searching for extreme eigenvalues of symmetric matrices is considered. Such problems are met in computational mechanics. We offer a modification of simple iteration method for searching of eigenvalues of matrices which uses the conjugate directions. This updating increases speed of convergence of the given method. Comparative numerical experiments have confirmed the efficiency of this modification of simple iteration method.

Keywords: *symmetric matrix, eigenvectors, eigenvalues, simple iteration method, the conjugate direction.*

Big number of publications is devoted to the problems of finding of eigenvalues [1–7]. Often it is necessary to find only minimum eigenvalue of symmetric matrix A. In this case it is easier to find minimum eigenvalue of positive definite matrix $A^* = A + rI$, with a corresponding choice of parameter $r > 0$.

Thus it is sufficiently to find eigenvalue of matrix A^* which corresponds to minimum eigenvalue A^*, and to check up the condition $x^T Ax > 0$. If it is satisfied then matrix A is positive definite.

Let's generalize inverse iteration method [4] for positive definite matrix A^*. For acceleration of its convergence we use procedure of construction of the conjugate directions. Two vectors x and z are conjugate, if $x^T A^* z = 0.$ In inverse iteration method instead of vector x^{k+1} we will take its correction so that the new vector equals to $z^{k+1} = x^{k+1} - \alpha x^k$, where parameter α is chosen from a condition that vectors x^k and z^{k+1} are conjugate. It means, that

$$(x^k)^T A^* z^{k+1} = (x^k)^T A^* (x^{k+1} - \alpha x^k) = (x^k)^T A^* x^{k+1} - \alpha (x^k)^T A^* x^k = 0,$$

from whence it follows

$$\alpha = \frac{(x^k)^T A^* x^{k+1}}{(x^k)^T A^* x^k}.$$

Let's equate $x^{k+1} = z^{k+1}$. We will run the process of searching of eigenvalue with inverse iteration method. Required eigenvalue will be reached, if condition $|| x^{k+1} - x^k || \leq \varepsilon$ with prescribed accuracy ε is satisfied. Convergence of the conjugate method follows directly from convergence of simple iteration method. We will notice, that value

$$\alpha = \beta \frac{(x^k)^T A^* x^{k+1}}{(x^k)^T A^* x^k},$$

where $\beta \in (0,1]$, preserve conjugate vectors x^k and z^{k+1}. But β is the adjustable parameter and sometimes speed of convergence of the considered method depends on a choice of corresponding value of parameter β. For reduction of calculations in the formula for parameter α we will replace matrix A^* with the inverse. Then

$$\alpha = \beta \frac{(x^k)^T (A^*)^{-1} x^{k+1}}{(x^k)^T (A^*)^{-1} x^k} = \beta \frac{|| x^{k+1} ||^2}{(x^k)^T x^{k+1}}.$$

It allows to increase speed and accuracy of calculations of eigenvalue (we recommend to choose $\beta = 0{,}5$). At first we find eigenvector x^*, then we calculate minimum eigenvalue using the formula

$$\lambda_{\min} = \frac{x^{*T} A x^*}{x^{*T} x^*}.$$

Convergence of considered method for search of eigenvector corresponding to minimum eigenvalue depends on a choice of initial vector. As initial a point x^0 it is enough to take a point (vector) that is not orthogonal to required eigenvector. The point that satisfies this condition is

$$x^0 = \frac{(A^*)^{-1} e}{\sqrt{a_{ii}^{-1}}},$$

where $e = (1,\ldots,1)$, a_{ii}^{-1} is the i-th diagonal element of the matrix $(A^*)^{-1}$, and the value of i is chosen from a maximum condition $||x^0||$.

REFERENCES

1. ***Demmel J. W.*** Applied Numerical Linear Algebra / J. W. Demmel. – University of California, Berkeley, California, 1997. – 431 p. (in Russian).
2. ***Collatz L.*** Eigenwertaufgaben mit technischen anwendungen / L .Collatz. – Leipzig: Akademische verlagsgesellschaft, 1963. – 500 p. (in Russian).
3. ***Ortega J. M.*** An Introduction to Numerical Methods for Differential Equations / J. M. Ortega, W. G. Poole. – Jr. Pitman Publishing Inc., 1981. – 329 p. (in Russian).
4. ***Parlett B. N.*** The symmetric Eigenvalue Problem / B. N. Parlett. – University of California, Berkeley, California, 1980. – 348 p. (in Russian).
5. ***Wilkinson J. H.*** The Algebraic Eigenvalue Problem / J. H. Wilkinson. – NewYork: Oxford Univ. Press. – 1965. – 662 p. (in Russian).
6. ***Harrar D. L.*** Parallel solution of some large-scale eigenvalue problems arising in chemistry and physics / D. L. Harrar, M. R. Osborne // Applied Parallel Computing Large Scale Scientific and Industrial Problems. – 1998. – Vol. 1541. – P. 216–223.
7. ***Prodi G.*** Eigenvalues of non-linear problems / G. Prodi (ed.). – Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. – 238 p.

Український державний
хіміко-технологічний університет,
Дніпропетровськ, Україна

Надійшла до редколегії 15.11.2012