УДК 519.85

А.И. Косолап

ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОИСК ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ СИММЕТРИЧНЫХ МАТРИЦ

ГВУЗ «Украинский государственный химико-технологический университет», г. Днепропетровск

Рассмотрена задача поиска экстремальных собственных значений симметричных матриц, которая возникает во многих приложениях вычислительной химии. Предложена модификация метода простой итерации для поиска собственных значений матриц, которая позволила увеличить скорость сходимости данного метода. Сравнительные численные эксперименты подтверждают эффективность данной модификации метода простой итерации.

Введение

Вычисление собственных значений матриц используется в химии при решении задач из области химической кинетики и теории реакторов, при анализе нормальных колебаний в молекулярной спектроскопии и наиболее часто в приближенных квантово-химических расчетах [1–2].

В настоящее время наилучшим методом для нахождения всех собственных значений матрицы A является QR-алгоритм [3], однако его программная реализация является достаточно сложной. Во многих приложениях необходимо находить одно собственное значение. 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 [4]. Будем далее рассматривать только симметричные матрицы. Для нахождения максимального собственного значения находят соответствующий собственный вектор по итерационной процедуре $x^{k+1}=Ax^k$, $k=0,1,....$ На каждом шаге вектор x^{k+1} нормируется (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 значение определяется по формуле $\lambda=x^TAx/\|x\|^2$, где $\|.\|$ – означает евклидову норму. Для нахождения минимального собственного значения матрицы A рассматривается итерационная процедура для обратной матрицы $x^{k+1}=A^{-1}x^k$, $k=0,1,....$. Метод простой итерации сходится глобально к собственному вектору с любой начальной точки, кроме точек гиперплоскости, для которой искомый собственный вектор является нормалью [3]. Однако, сходимость метода простой итерации медленная [3]. Предлагались различные усовершенствования данного метода, но они лишь в некоторых случаях позволяют ускорить его сходимость [4].

В настоящей работе предлагается модификация метода простой итерации, 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

$$\min\{x^TAx \mid \|x\|^2=1\}. \qquad (1)$$

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

$$\max\{\|x\|^2 \mid x^TAx=1\}. \qquad (2)$$

Если матрица A – положительно определенная ($x^TAx>0$, $\forall\, x\neq0$), то задача (2) имеет простую геометрическую интерпретацию. В задаче (2) необходимо найти точку последнего касания шара

Симметричная матрица

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

$\{x \mid \|x\|^2=R^2\}$ границы эллипсоида $\{x \mid x^TAx=1\}$при увеличении радиуса шара R. Преобразуем симметричную матрицу A к положительно определенной посредством увеличения ее диагональных элементов $A^*=A+rI$, где $r>0$ константа, а I – единичная матрица. Покажем, что собственные вектора матриц A и A^* совпадают, а собственные значения удовлетворяют условию $\lambda^*=\lambda+r$. Действительно, из $Ax=\lambda x$ следует $(A+rI)x=(\lambda+r)x$, откуда $\lambda+r$ – собственное значение матрицы A^*.

Таким образом, для проверки положительной определенности матрицы A достаточно найти собственный вектор матрицы A^*, соответствующий минимальному собственному значению A^*, и проверить условие $x^TAx>0$. 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. 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 $x^TA^*x=0$. 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 б выбираем из условия, что векторы x^k и z^{k+1} – сопряженные. Это означает, что

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

откуда

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

Полагаем $z^{k+1}=x^{k+1}$ и процесс поиска собственного вектора методом обратной итерации продолжается. Искомый собственный вектор будет достигнут, если выполнится условие

$$(x^0)^T(A^*)^{-2k-1}x^0=$$
$$=\sqrt{(x^0)^T(A^*)^{-2k}x^0\cdot(x^0)^T(A^*)^{-2k-2}x^0},$$

которое равносильно коллинеарности векторов x^k и x^{k+1} либо $x^{k+1}=x^k$ с заданной точностью. Сходимость сопряженного метода следует непосредственно из сходимости метода простой итерации. Заметим, что значение

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

где $\beta\in(0,1]$, сохраняет сопряженность векторов x^k и z^{k+1}. Скорость сходимости рассмотренного метода для конкретной матрицы иногда зависит от выбора соответствующего значения параметра β.

Сравнительные эксперименты

Средствами VBA Excel были разработаны программы метода обратной итерации, метода итерации с отношением Релея и данной модификации (соответственно PI, PIR, PIM). Эксперименты проводились для матриц различного размера со сложной структурой. Ниже приведена матрица (таблица), 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.

Преимущество метода PIM наблюдалось и в многочисленных других экспериментах со сложными матрицами. Эксперименты проводились на двухъядерном процессоре Pentium Core i5 с частотой 2,5 ГГц.

Выводы

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Jensen F.* Introduction to Computational Chemistry. – Chichester, New York, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto: John Wiley & Sons, 2001. – 222 p.

2. *Lewars E.G.* Computation Chemistry, second edition. – Dordrecht, Heidelberg, London, New York: Springer, 2011. – 681 p.

3. *Ортега Дж., У. Пул.* Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений: 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: пер. с англ. Х.Д. Икрамова и Ю.А. Кузнецова. – М.: Мир, 1983. – 384 с.

Поступила в редакцию 29.11.2012