V. N. Kublanovskaja

Применение нормализованного разложения к решению частичной проблемы собственных значений матрицы

Acta Universitatis Carolinae. Mathematica et Physica, Vol. 15 (1974), No. 1-2, 67--78

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/142329

1974 ACTA UNIVERSITATIS CAROLINAE - MATHEMATICA ET PHYSICA NO. 1-2 PAG. 67-78

Применение нормализованного разложения к решению частичной проблемы собственных значений матрицы

В. Н. КУБЛАНОВСКАЯ
Академия Наук СССР, ЛОМИ, Ленинград

V. N. Kublanovskaja: Application of Normalized Transformation to the Solution of Eigenvalue Matrix Problem

Ниже рассматриваются алгоритмы вычисления изолированного собственного значения и соответствующих ему линейно независимых собственных векторов матрицы, элементы которой могут нелинейно зависеть от параметра, а также алгоритмы построения векторов канонического базиса для матриц произвольной жордановой формы. Для положительно определенной матрицы предлагаются алгоритмы двухсторонних приближений к последовательно определяемым собственным значениям, начиная с наименьшего. Все алгоритмы основаны на применении нормализованного разложения произвольной квадратной матрицы в произведение левой треугольной (с предписанным расположением диагональных элементов) и ортогональной матриц, а также на применении нормализованной схемы метода Холецкого в случае положительно определенной матрицы.

1. **Описание нормализованного процесса.** Под нормализованным разложением вещественной матрицы A порядка n будем понимать разложение вида

$$\Theta A = \mathscr{L} Q^T \, . \tag{1}$$

Здесь Θ — результирующая матрица перестановок, Q — ортогональная матрица, $\mathscr{L}$ — левая треугольная нормализованная матрица с элементами l_{ij}, удовлетворяющими неравенствам

$$|l_{11}| \geqslant |l_{22}| \geqslant \ldots \geqslant |l_{nn}| \geqslant 0 \, , \quad |l_{ji}| \leqslant |l_{ii}| \, , \; j > i \, . \tag{2}$$

Разложение (1), (2) можно получить [1] или с помощью элементарных матриц плоских вращений или с помощью элементарных эрмитовых матриц, применяя перестановку строк преобразуемой матрицы в некотором «нормализованном» порядке. Этот нормализованный порядок заключается в том, что ведущей строкой (строкой, в которой требуется получить нули в нужных позициях) на k-м шаге процесса будет строка с номером $k_0 \geq k$, для элементов которой выполняется

$$\sum_{i=k}^{n} [a_{k_0,i}^{(k)}]^2 = \max_{s} \sum_{i=k}^{n} [a_{si}^{(k)}]^2 ,$$

где максимум берется по всем $s = k, \ldots, n$. Здесь через $a_{ij}^{(k)}$ -обозначены элементы преобразуемой матрицы после шага k.

В случае положительно определенной (положительно полуопределенной) матрицы A будем наряду с техникой ортогональных преобразований применять так называемый нормализованный метод квадратного корня [2], позволяющий получать разложение вида

$$\Theta^T A \Theta = \Lambda \Lambda^T , \tag{3}$$

где Θ — результирующая матрица перестановок, Λ — левая нормализованная матрица, т.е. матрица элементы которой удовлетворяют неравенствам

$$l_{11} \geqslant l_{22} \geqslant \ldots \geqslant l_{nn} \geqslant 0 , \qquad |l_{ji}| \leq l_{ii} . \tag{4}$$

Разложение (3), (4) может быть получено с помощью следующих двух схем.

Схема 1 является модификацией метода Холецкого и осуществляется за n шагов. При переходе k $(i + 1)$-ому шагу $(i = 0,1, \ldots, n - 1)$ переставляются строки и столбцы преобразуемой матрицы так, чтобы ведущая $(i + 1)$-я строка имела максимальную величину $\sigma_p = a_{pp}^{(i)} - \sum\limits_{s=1}^{i} [l_{sp}^{(i)}]^2$, где максимум берется по всем $p = i + 1, \ldots, n$. Здесь через $l_{sp}^{(l)}$ обозначены элементы p-го столбца матрицы Λ с учетом сделанных перестановок. Далее вычисляются элементы $(i + 1)$-го столбца матрицы Λ по формулам метода Холецкого. Результатом n-го шага будет искомая матрица Λ.

Если исходная матрица A — вырожденная ранга r, то процесс закончится через r шагов, преобразуемая матрица будет $[\Lambda^{(r)} \ldots 0]$, где $\Lambda^{(r)}$ — матрица $n \times r$ ранга r, 0 — нулевая $n \times (n - r)$ матрица.

Вторая схема позволяет наряду с разложением (3) вычислять обратную матрицу Λ^{-1} для левой нормализованной матрицы Λ. При этом обратная матрица получается в факторизованном виде.

Процесс состоит в построении последовательности матриц $A_1 = A, A_2, \ldots, A_{n+1}$ по предписанию

$$A_{k+1} = H_k \Theta_k^T A_k \Theta_k \quad k = 1, \ldots, n , \tag{5}$$

где $A_{n+1} = \Lambda^T$ — правая треугольная матрица, Θ_k — матрица перестановок, выбираемая так, чтобы в позиции (k, k) преобразуемой матрицы стоял макси мальный по модулю диагональный элемент: $|a_{kk}^{(k)}| = \max\limits_{i=k,\dots,n} |a_{ii}^{(k)}|$

$$H_k = E + (\eta_k - e_k)\, e_k^T,\ \eta_k = \left(0, \dots, 0, \frac{1}{\sqrt{a_{kk}^{(k)}}}, -\frac{a_{k+1,k}^{(k)}}{\sqrt{a_{kk}^{(k)}}}, \dots, -\frac{a_{nk}^{(k)}}{\sqrt{a_{kk}^{(k)}}}\right)^T,$$

e_k — столбец с номером k — единичной матрицы E.

Из (5) следует, что $\Lambda^T = H_n H_{n-1} \Theta_{n-1}^T \dots H_2 \Theta_2^T H_1 \Theta_1^T A \Theta$, где $\Theta = \Theta_1 \dots \Theta_{n-1}$, так что $\Lambda^{-1} = H_n H_{n-1} \Theta_{n-1}^T \dots H_1 \Theta_1^T \Theta$.

2. **Определение изолированного собственного значения матрицы*).** Обозначим через $\mathscr{D}(\lambda)$ квадратную матрицу, элементы которой суть аналитические функции в рассматриваемой области Ω изменения параметра λ. (В частности $\mathscr{D}(\lambda)$ есть полиномиальная матрица $\mathscr{D}(\lambda) = A_0\lambda^s + \dots + A_s$, где A_i - квадратные постоянные матрицы). И пусть

$$\Theta(\lambda)\, \mathscr{D}(\lambda) = \mathscr{L}(\lambda)\, Q^T(\lambda) \tag{6}$$

есть нормализованное разложение матрицы $\mathscr{D}(\lambda)$, так что элементы левой нормализованной матрицы $\mathscr{L}(\lambda)$ удовлетворяют неравенствам:

$$|l_{11}(\lambda)| \geqslant |l_{22}(\lambda)| \geqslant \dots \geqslant |l_{nn}(\lambda)|\,, \quad |l_{ji}(\lambda)| \leqslant |l_{ii}(\lambda)|\,, \quad j > i\,. \tag{7}$$

Число $\lambda = \mu$ из Ω будет корнем уравнения $\det \mathscr{D}(\lambda) = 0$, тогда и только тогда, когда в нормализованном разложении (6) матрицы $\mathscr{D}(\mu)$, по крайней мере, последний диагональный элемент левой нормализованной матрицы $\mathscr{L}(\mu)$ будет нулевым; при этом число нулевых диагональных элементов $\mathscr{L}(\mu)$ равно числу линейно независимых векторов x, удовлетворяющих уравнению $\mathscr{D}(\mu)\, x = 0$. Этими векторами будут столбцы q_i ортогональной матрицы $Q(\mu)$, номера которых совпадают с номерами нулевых столбцов $\mathscr{L}(\mu)$. Отсюда нормализованное разложение (6), (7) матрицы $\mathscr{D}(\lambda)$ позволяет решение детерминантного уравнения $\det \mathscr{D}(\lambda) = 0$ сводить к решению эквивалентного ему скалярного уравнения

$$f(\lambda) = 0\,, \tag{8}$$

где $f(\lambda) = l_{nn}(\lambda)$ — последний диагональный элемент левой нормализованной матрицы $\mathscr{L}(\lambda)$ разложения (6).

Сказанное очевидным образом следует из равенства

$$\det \mathscr{D}(\lambda) = \det \Theta(\lambda)\,.\, \det \mathscr{L}(\lambda)\,.\, \det Q(\lambda) = \pm\, l_{11}(\lambda)\, l_{22}(\lambda) \dots l_{nn}(\lambda)$$

с учетом неравенств (7).

Заметим, что формульная зависимость функции f от λ неизвестна. Известно лишь правило вычисления $f(\lambda)$ в любой фиксированной точке области Ω.

---

* В этом пункте мы рассматриваем применение нормализованного процесса к решению частичной проблемы собственных значений матриц нелинейно зависящих от параметра λ. Все результаты применимы в частности для матрицы $\mathscr{D}(\lambda) = A - \lambda E$, где A — постоянная квадратная матрица.

Но в области $\Omega_1 \subset \Omega$, где матрица перестановок $\Theta(\lambda)$ стабилизировалась можно вычислить [3] ньютоновскую поправку для скалярной функции $f(\lambda)$. Так имея разложение (6), ньютоновскую поправку $\dfrac{f(\lambda)}{f'(\lambda)} = \dfrac{1}{\xi_n(\lambda)}$ находим, определяя последнюю компоненту $\xi_n(\lambda)$ решения $\mathscr{X}(\lambda)$ системы

$$\mathscr{L}(\lambda)\,\mathscr{X}(\lambda) = \Theta(\lambda)\,\mathscr{D}'(\lambda)\,q_n(\lambda)\,,$$

где q_n — последний столбец ортогональной матрицы $Q(\lambda)$. Последовательные приближения к уточняемому собственному значению матрицы можно получать по методу Ньютона $\mu_{k+1} = \mu_k - \dfrac{1}{\xi_k}$, $k = 0, 1, \ldots$, где $\xi_k = \xi(\mu_k)$, μ_0 — начальное приближение.

В условиях сходимости метода Ньютона процесс будет иметь асимптотически квадратичную сходимость.

Аналогичный процесс [4] строится для уточнения вещественной и мнимой частей пары комплексно-сопряженных собственных значений $\mu_* \pm i\nu_*$ вещественной матрицы A и построения им соответствующих собственных векторов. Используя только вещественную арифметику, процесс позволяет находить ньютоновские поправки для определения μ_* и ν_* из нормализованного разложения матрицы $B(\mu, \nu) = (A - E\mu)^2 + 2\nu^2 E$ при фиксированных значениях μ и ν.

Последовательные приближения μ_k и ν_k находятся по формулам

$$\mu_{k+1} = \mu_k - \nabla_k^{(1)} \qquad \nu_{k+1} = \nu_k - \nabla_k^{(2)}\,,$$

$$\nabla_k^{(1)} = \frac{y_{n-1}^{(2)} - y_n^{(1)}}{x_n^{(1)} y_{n-1}^{(2)} - x_{n-1}^{(2)} y_n^{(1)}}\,, \qquad \nabla_k^{(2)} = \frac{x_n^{(1)} - x_{n-1}^{(2)}}{x_n^{(1)} y_{n-1}^{(2)} - y_n^{(1)} x_{n-1}^{(2)}}\,.$$

Здесь $X_i = (x_1^{(i)}, \ldots, x_{n-1}^{(i)}, x_n^{(i)})^T$, $Y_i = (y_1^{(i)}, \ldots, y_{n-1}^{(i)}, y_n^{(i)})^T$ решения систем

$$\mathscr{L}\,X_i = \Theta\,\frac{\partial}{\partial\mu}\,B(\mu, \nu)\,q_{n-i}\,; \quad \mathscr{L}\,Y_i = \Theta\,\frac{\partial}{\partial\nu}\,B(\mu, \nu)\,q_{n-i}\,, \qquad (i = 1,2)$$

$\mathscr{L}, \Theta, Q = [q_1, \ldots, q_n]$ — соответствующие матрицы нормализованного разложения матрицы $B(\mu, \nu)$ при фиксированных значениях μ_k и ν_k.

Пусть матрица $\mathscr{D}(\lambda)$ — положительно определенная в области Ω и пусть

$$\Theta^T(\lambda)\,\mathscr{D}(\lambda)\,\Theta(\lambda) = \Lambda(\lambda)\,\Lambda^T(\lambda) \tag{9}$$

есть нормализованное разложение матрицы $\mathscr{D}(\lambda)$, так что элементы левой нормализованной матрицы $\Lambda(\lambda)$ удовлетворяют неравенствам:

$$l_{11}(\lambda) \geqslant \ldots \geqslant l_{nn}(\lambda) \geqslant 0\,, \quad |l_{ji}(\lambda)| \leq l_{ii}(\lambda)\,, \quad j > i\,. \tag{10}$$

Число $\lambda = \mu$ будет корнем $\det \mathscr{D}(\lambda) = 0$ тогда и только тогда, когда в нормализованном разложении матрицы $\mathscr{D}(\mu)$ по крайней мере последний диагональный элемент левой нормализованной матрицы $\mathscr{L}(\mu)$ будет нулевым; число нулевых диагональных элементов $\Lambda(\mu)$ равно числу линейно независимых векторов x, удовлетворяющих уравнению $\mathscr{D}(\mu)\,x = 0$. Так что нормализованное разложение (9), (10) позволяет решение детерминантного уравнения $\det \mathscr{D}(\lambda) = 0$ сводить к решению эквивалентного ему скалярного уравнения

$$\varphi(\lambda) = 0\,, \tag{11}$$

где $\varphi(\lambda) = l_{nn}^2(\lambda)$, $l_{nn}(\lambda)$ — последний диагональный элемент левой нормализованной матрицы $\Lambda(\lambda)$ разложения (9).

В рассматриваемом случае разложение (9) позволяет в области $\Omega_1 \subset \Omega$, где матрица перестановок $\Theta(\lambda)$ стабилизировалась, находить не только ньютоновскую поправку, но и лагеровскую поправку к определяемому корню уравнения (11).

Так для определения $\xi_k = \dfrac{\varphi'(\mu_k)}{\varphi(\mu_k)}$ следует решить системы

$$\Lambda_k^T W_k = e_n\,, \qquad \Lambda_k \mathscr{Z}_k = \Theta_k^T \mathscr{D}(\mu_k)\,\Theta_k W_k\,, \tag{12}$$

$e_n = (0, \ldots, 0, 1)^T$, ξ_k есть последняя компонента решения $\mathscr{Z}_k$. Для определения величины $\left[\dfrac{\varphi'(\mu_k)}{\varphi(\mu_k)}\right]^2 - \dfrac{\varphi''(\mu_k)}{\varphi(\mu_k)} \equiv \varkappa_k$ следует кроме решения $\mathscr{Z}_k$ системы (12) найти последнюю компоненту η_k решения X_k системы

$$\Lambda_k X_k = \Theta_k^T \mathscr{D}''(\mu_k)\,\Theta_k W_k\,. \tag{13}$$

Тогда
$$\varkappa_k = \mathscr{Z}_k^T \mathscr{Z}_k - \eta_k\,.$$

Таким образом, для решения скалярного уравнения (11) можем применять методы, реализация которых требует знания первой и второй производной в фиксированной точке области.

3. **Построение двухсторонних оценок и системы стягивающихся сегментов.** В условиях ошибок округления представляют особый интерес алгоритмы, дающие двухсторонние приближения к определяемой величине. Наличие двухсторонних приближений позволяет судить о точности полученного результата и не требует дополнительного анализа ошибок округления. Ниже предлагаются два алгоритма построения двухсторонних приближений к последовательно определяемым (начиная с наименьшего) собственным значениям положительно определенной матрицы.

Пусть A — положительно определенная матрица с собственными значениями $\lambda_1 > \lambda_2 > \ldots > \lambda_n$; λ — произвольное значение из $[0, \lambda_n]$, так что $\mathscr{D}(\lambda) = A - \lambda E$ — положительно определенная матрица, и пусть (9), (10) есть нормализованное разложение $\mathscr{D}(\lambda)$, построенное по схеме нормализованного квадратного корня. Тогда справедливы оценки [2]:

$$\lambda + \Delta(\lambda) \leqslant \lambda_n \leqslant \lambda + \delta(\lambda)\,, \tag{14}$$

где

$$\Delta(\lambda) = \frac{n}{S_1 + \sqrt{(n-1)[nS_2 - S_1^2]}}, \quad n \text{ — порядок } A,$$

$$S_1 = \operatorname{sp}(\Lambda^{-1}(\lambda)\Lambda^{T-1}(\lambda)), \quad S_2 = \operatorname{sp}(\Lambda^{-1}(\lambda)\Lambda^{T-1}(\lambda))^2,$$

$$\delta(\lambda) = \frac{l_{nn}^2(\lambda)\, l_{n-1,n-1}^2(\lambda)}{l_{n,n-1}^2(\lambda) + l_{n-1,n-1}^2(\lambda)}.$$

Справедливость оценки снизу следует из известного (см. [6]) представления λ_n в виде

$$\lambda_n = \lambda + \frac{n}{\sum_1 + \sqrt{(n-1)[n\sum_2 - \sum_1^2 - \varrho^2]}},$$

где $\sum_1 = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\lambda_i - \lambda}$, $\sum_2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{(\lambda_i - \lambda)^2}$, ϱ^2 — положительная величина, зависящая от собственных значений матрицы A.

Справедливость оценки сверху следует из представления λ_n в виде [7]:

$$\lambda_n = [l_{11}l_{22}\ldots l_{nn}]^2 \Big/ \Big\{ [l_{11}l_{22}\ldots l_{n-1,n-1}\, l_{n,n-1}]^2 + \\ + \sum_{t=0}^{\infty} \sideset{}{'}\sum_{1\leqslant \alpha_1 < \ldots \leqslant \alpha_{n-1} \leqslant n} \left[\mathscr{L}_t \begin{pmatrix} \alpha_1 \ldots \alpha_{n-1} \\ 1 \ldots n-1 \end{pmatrix}\right]^2 \Big\},$$

где $\mathscr{L}_t \begin{pmatrix} \alpha_1 \ldots \alpha_{n-1} \\ 1 \ldots n-1 \end{pmatrix}$ — минор порядка $n-1$, составленной из элементов матрицы $\mathscr{L}_t$, стоящих на пересечении строк с нумерами $\alpha_1, \ldots, \alpha_{n-1}$ и столбцов с нумерами $1, \ldots, n-1$; знак $\sum'$ означает, что суммирование идет по всем $1 \leqslant \alpha_1 < \ldots < \alpha_{n-1} \leqslant n$ кроме $\alpha_1 = 1, \ldots, \alpha_{n-1} = n-1$. $\mathscr{L}_t$ — левая треугольная матрица, удовлетворяющая соотношению $\Theta_t^T \mathscr{L}_{t-1}^T \mathscr{L}_{t-1}\Theta_t = \mathscr{L}_t \mathscr{L}_t^T$, Θ_t — результирующая матрица перестановок.

Оценки (14) используются для построения системы стягивающихся сегментов $[\underline{\mu}_k, \overline{\mu}_k] \ni \lambda_n$, $k = 0, 1, \ldots$. Построение $\underline{\mu}_k$ и $\overline{\mu}_k$ осуществляется по предписанию:

$$\underline{\mu}_0 = 0, \ \underline{\mu}_{k+1} = \underline{\mu}_k + \Delta_k, \ \overline{\mu}_{k+1} = \underline{\mu}_k + \delta_k, \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{17}$$

Здесь $\Delta_k = \Delta(\underline{\mu}_k)$, $\delta_k = \delta(\underline{\mu}_k)$ вычисляются по элементам левой треугольной нормализованной матрицы $\Lambda_k = \Lambda(\underline{\mu}_k)$, полученной при разложении матрицы $\mathscr{D}_k = A - \underline{\mu}_k E$ по нормализованной схеме квадратного корня. При любом $k = 0, 1, \ldots$ выполняется $\underline{\mu}_k \leqslant \lambda_n \leqslant \overline{\mu}_k$, и если λ_n — изолированное собственное значение, то имеет место кубическая сходимость $\overline{\mu}_k - \underline{\mu}_k \to 0$ при $k \to \infty$.

Второй процесс построения системы стягивающихся сегментов $[\nu_{2k}, \nu_{2k+1}]$ состоит в построении последовательности чисел ν_k по предписанию:

$$\nu_0 = 0\,, \quad \nu_{k+1} = \nu_k + \delta_k\,, \quad k = 0, 1, \ldots\,, \tag{18}$$

где $\delta_k = \delta(\nu_k)$ строится по элементам левой нормализованной матрицы Λ_k, полученной при разложении матрицы $\mathscr{D}_k = A - \nu_k E$ по нормализованной схеме квадратного корня.

Сходимость $\nu_{2k+1} - \nu_{2k} \to 0$ при $k \to \infty$ доказана в предположении, что последовательность $\delta_0, \delta \ldots$ монотонно убывает и $\delta_0 - \lambda_n < \lambda_{n-1} - \delta_0$.

О нарушении последнего неравенства можно судить по поведению на первых шагах процесса последовательных приближений к λ_n (на четных шагах процесса добавка к предыдущему приближению должна увеличивать его, при нечетных шагах — уменьшать).

Замечание. Нижняя оценка в (14) справедлива без предположения нормализованного разложения матрицы A, верхняя оценка также верна в более широких предположениях (достаточно потребовать, чтобы диагональные элементы левой треугольной матрицы выстроились в порядке убывания по абсолютной величине).

Учитывая это замечание, применим выведенные оценки в алгоритмах QR и LR.

Алгоритмы QR и LR, примененные для решения полной проблемы собственных значений матрицы простой структуры (алгоритм QR) и положительно определенной матрицы (алгоритм LR) имеют тенденцию выстраивать диагональные элементы, встречающихся по ходу процесса левых треугольных матриц, в порядке убывания по абсолютной величине.

Справедливость этого утверждения вытекает а) из асимптотических равенств (см., например, [8])

$$[l_{ii}^{(k)}]^2 = \lambda_i^2 \left\{1 + O\left[\left|\frac{\lambda_{i+1}}{\lambda_i}\right|^k\right] + O\left[\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}}\right|^k\right]\right\} \quad i = 1, 2, \ldots, n \;(\lambda_0 = \lambda_{n+1} = 0)\,,$$

если алгоритм QR протекает по предписанию

$$A_{k+1} = Q_k^T \mathscr{L}_k\,, \quad \mathscr{L}_{k+1} = A_{k+1} Q_{k+1}\,, \quad A_1 = A\,, \quad k = 0, 1, \ldots\,. \tag{I}$$

(Здесь и ниже λ_i — собственные значения исходной матрицы A занумерованные в порядке убывания по абсолютной величине, Q_k — ортогональная матрица, $\mathscr{L}_k$ — левая треугольная матрица); б) из асимптотических равенств

$$[l_{ii}^{(k)}]^2 = (\lambda_i - t_k)^2 \left\{1 + O\left[\frac{\varphi_k(\lambda_{i+1})}{\varphi_k(\lambda_i)}\right] + O\left[\frac{\varphi_k(\lambda_i)}{\varphi_k(\lambda_{i-1})}\right]\right\}\,,$$

$$\varphi_k(t) = t(t - t_2) \ldots (t - t_k)\,,$$

если алгоритм QR протекает по предписанию

$$A_{k+1} = Q_k^T \mathscr{L}_k - (t_{k+1} - t_k)\,E\,, \qquad \mathscr{L}_{k+1} = A_{k+1} Q_{k+1}\,. \tag{II}$$

Здесь t_1, t_2, ... — последовательность сдвигов, стремящихся к некоторому числу σ при $k \to \infty$, и собственные значения матрицы A в некоторой нумерации удовлетворяют соотношению:

$$|\lambda_1 - \sigma| > |\lambda_2 - \sigma| > \ldots > |\lambda_n - \sigma| .$$

Аналогичные асимптотические равенства имеют место для алгоритма LR, протекающего по предписанию: $A_k = \Lambda_k \Lambda_k^T$, $A_{k+1} = \Lambda_k^T \Lambda_k$, $A_1 = A$, $k = 1, 2, \ldots$, или по предписанию: $A_k = \Lambda_k \Lambda_k^T$, $A_{k+1} = \Lambda_k^T \Lambda_k - (t_{k+1} - t_k) E$, $k = 1, 2, \ldots$, где сдвиг $(t_{k+1} - t_k)$ выбирается согласно некоторой стратегии (см., например, [9]) не нарушающей положительную определенность матриц A_k, $k = 1, 2, \ldots$.

Это свойство алгоритмов QR и LR может быть использовано для построения верхних оценок для определяемых собственных значений, а в случае положительно определенной матрицы (при надлежащем выборе сдвигов) и для построения двухсторонних оценок.

Так пусть начиная с шага k процесса (I) диагональные элементы $\mathscr{L}_k$ удовлетворяют неравенствам $|l_{11}^{(k)}| \geqslant \ldots \geqslant |l_{nn}^k|$. Матрицу $\mathscr{L}_k$ можно рассматривать как левую треугольную матрицу разложения $A_k^2 = \mathscr{L}_k \mathscr{L}_k^T$, причем собственные значения A_k^2 суть $\lambda_1^2 > \ldots > \lambda_n^2$, так что можем записать

$$|\lambda_n| \leq \frac{|l_{nn}^{(k)}|\,|l_{n-1,n-1}^{(k)}|}{\sqrt{l_{n,n-1}^{(k)2} + l_{n-1,n-1}^{(k)2}}} .$$

Такие же оценки можно написать для $\lambda_n - t_k$ в алгоритме со сдвигом протекающем по предписанию II.

Аналогичные заключения имеют место для алгоритма $\mathscr{L}R$.

4. **Вычисление собственных подпространств.** Если определяемому собственному значению μ матрицы $\mathscr{D}(\mu)$ соответствует $n - r$ линейно независимых собственных векторов, то последние $n - r$ столбцов левой треугольной матрицы в нормализованном разложении (I) для матрицы $\mathscr{D}(\mu)$ будут нулевыми, так что $n - r$ последних столбцов ортогональной матрицы являются линейно независимыми собственными векторами матрицы $\mathscr{D}(\mu)$.

В условиях ошибок округления будет найдено приближение $\bar{\mu}$ к собственному значению μ и последние $n - r$ столбцов ортогональной матрицы $\tilde{Q}$ нормализованного разложения

$$\tilde{\Theta}\tilde{\mathscr{D}} = \tilde{\mathscr{L}}\tilde{Q}^T , \qquad \tilde{\mathscr{D}} = \mathscr{D}(\bar{\mu}) \tag{19}$$

будут приближениями к собственным векторам $\mathscr{D}(\mu)$.

Если существует разрыв в диагональных элементах матрицы $\tilde{\mathscr{L}}$, так что $\left|\dfrac{l_{r+1,r+1}}{l_{r,r}}\right| < < 1$, то искомое собственное подпространство можно уточнить, взяв в качестве него последние $n - r$ столбцов ортогональной матрицы $\hat{Q}$ нормализованного разложения

$$\hat{\Theta}\,\hat{\mathscr{D}} = \hat{\mathscr{L}}\,\hat{Q}^T , \quad \text{где } \hat{\mathscr{D}} = \mathscr{D}(\hat{\mu}), \quad \hat{\mu} = \hat{\mu} + \frac{1}{n-r} \sum_{s=r+1}^{n} \alpha_s , \tag{20}$$

$\alpha_{r+1}, \ldots, \alpha_n$ — малые по абсолютной величине собственные значения матрицы $\tilde{\mathscr{D}}$. Они могут быть найдены из уравнений $f_s(\lambda) = l_{ss}(\lambda) = 0$, $s = r + 1, \ldots, n$, решаемых методом Ньютона с нулевым начальным приближением. Так для определения ньютоновской поправки $\varkappa_s^{(s)} = \frac{f'_s}{f_s}$ следует найти решение $X_s = (\varkappa_{1,\ldots}^{(s)}, \varkappa_s^{(s)})^T$ системы $L_s X_s = g_s$, где L_s — матрица $r \times r$ главного минора матрицы $\tilde{\mathscr{L}}$ разложения (19), g_s — первые s компонент столбца с номером s матрицы $\tilde{\Theta}\,\tilde{Q}$. Обозначим через $\hat{Q}_{n-r}$ матрицу из последних $n-r$ столбцов $\hat{Q}$. Близость $\hat{Q}_{n-r}$ к точному собственному подпространству T_{n-r} будет зависеть от величины отношения $\frac{\sigma_{r+1}}{\sigma_r} = \min\limits_i \frac{\sigma_{i+1}}{\sigma_i}$, где σ_i — сингулярные значения матрицы $\hat{\mathscr{D}}$ и может быть также охарактеризована в терминах величины $\frac{l_{r+1,r+1}}{l_{r,r}}$, характеризующей разрыв диагональных элементов матрицы $\hat{\mathscr{L}}$ разложения (20). Так пусть $T_{n-r}^T\, Q_{n-r} = M$. Оценка близости T_{n-r} к $\hat{Q}_{n-r}$ характеризуется близостью матрицы M к ортогональной. Справедливы неравенства

$$\|MM^T - E\| \leqslant \delta_1, \quad \|M^TM - E\|_E \leqslant \frac{\delta_1^2}{\sqrt{1-\delta_1^2}},$$

где
$$\delta_1 = \frac{\sqrt{n-r}}{\alpha_r} \left| \frac{l_{r+1,r+1}}{l_{r,r}} \right|, \quad \alpha_r = 3 \Big/ \sqrt{4^r + 6r - 1}.$$

5. **Построение канонического базиса корневого подпространства.** Применим нормализованный процесс (1), (2) к построению канонического базиса корневого подпространства соответствующего собственному значению μ оператора $\mathscr{A}$, задаваемого матрицей A. Не умаляя общности считаем $\mu = 0$ и пусть $\mu = 0$ есть собственное значение кратности s вещественной матрицы A порядка n ранга r. Заметим, что алгоритм не предполагает известными числа r и s.

Алгоритм состоит из двух этапов: сначала строится вспомогательный базис корневого подпространства K_0, порожденного собственным значением $\mu = 0$, который затем перестраивается в канонический базис [10]. Рассмотрим два процесса построения вспомогательного базиса.

Первый процесс состоит в образовании ортогональной матрицы V, осуществляющей преобразование исходной матрицы A в подобную ей матрицу A_{m+1} вида

$$A_{m+1} = V^TAV = \left[\begin{array}{c:c:c:c:c} M_{r_m, z_m} & & & & \\ \cdots\cdots & O_{r_{m-1}, r_{m-1}-r_m} & & & \\ Y_{n-r_m, r_m} & \cdots\cdots & \cdots & \begin{array}{c} O_{r_1, r_1 - r_2} \\ \cdots\cdots \end{array} & O_{n, n-r_1} \\ & Y_{n-r_{m-1}, r_{m-1}-r_m} & & Y_{n-r_1, r_1-r_2} & \end{array}\right],$$

где через O_{kl} обозначена нулевая $k \times l$ матрица, $M_{r_m r_m}$ — неособенная матрица при $s < n$ (при $s = n$ матрица M_{r_m,r_m} — нулевая), $Y_{s,t}$ —, вообще говоря, ненулевые матрицы.

Процесс построения $V = V_1 V_2 \ldots \dot{V}_m$ состоит из m шагов. На первом шаге строится ортогональная матрица $V_1 = Q_{r_1}$, осуществляющая нормализованное разложение матрицы $A_1 = A : A = C_1 Q_{r_1}^T$, $C_1 = \Theta^T \mathscr{L} = [S_{n,r_1} : O_{n,n-r_1}]$, S_{n,r_1} матрица $n \times r$, ранга r_1.

Для построения матрицы $V_2 = \begin{bmatrix} Q_{r_2} & O \\ O & E \end{bmatrix}$, вычисляется ортогональная матрица Q_{r_2}, осуществляющая нормализованное разложение матрицы M_{r_1,r_1}, где M_{r_1,r_1} — клетка матрицы $A_2 = V_1^T A_1 V_1$ вида

$$A_2 = \left[\begin{array}{c:c} M_{r_1,r_1} & O_{n,n-r_1} \\ Y_{n-r_1,r_1} & \end{array}\right].$$

Очевидно, ранг матрицы A_2 равен r_1, рангу исходной матрицы. При $n - r_1 < s$ матрица M_{r_1,r_1} будет особенной ранга r_2, и процесс построения матриц V_i продолжается до тех пор пока на некотором шаге m не придем к нулевой или неособенной матрице $M_{r_{m1},r_{m1}}$.

Столбцы построенной матрицы V естественным образом объединяются в группы по $r_{i-1} - r_i$ столбцов в каждой группе ($i = 1, \ldots, m$):

$$V = [V_{r_m}^{(m)},\ V_{r_{m-1}-r_m}^{(m-1)}, \ldots, V_{r_1-r_2}^{(2)},\ V_{n-r_1}^{(1)}].$$

Последние $n - r_m$ столбцов матрицы V составляет искомый вспомогательный базис.

Заметим, что для построения матрицы V нет необходимости отдельно строить матрицы $V_1, \ldots, V_m$. Достаточно над столбцами единичной матрицы проделать те же преобразования, какие делаем над столбцами преобразуемой матрицы при переходе от исходной матрицы A к матрице A_m.

Второй способ построения вспомогательного базиса состоит в вычислении с помощью нормализованного процесса базисов ядер последовательных степеней оператора $\mathscr{A}$, имеющих $A_1\ A_1^2 \ldots, A^m$ своими матрицами. Для этого сначала находим базис ядра оператора $\mathscr{A}$, строя нормализованное разложение матрицы $A : A = C_1 Q_1^T$. Столбцы ортогональной матрицы Q_1 с нумерами $r_1 + 1, \ldots, n$, соответствующие нулевым столбцам матрицы $C_1 = \Theta_1^T \mathscr{L}$, образуют базис $ker\ \mathscr{A}$.

Для образования базиса $ker\ \mathscr{A}^2$ нормализованный процесс применяется к матрице AC_1, которая имеет нулевыми столбцы с нумерами $r_1 + 1, \ldots, n$. Одновременно над столбцами матрицы Q_1 проделываем те же преобразования, что и над столбцами матрицы AC_1. В результате найдем ортогональную матрицу Q_2 такую, что столбцы с нумерами $r_2 + 1, \ldots, n$ образуют ортогональный базис $ker\ \mathscr{A}^2$ при этом столбцы Q_2 с номерами $r_1 + 1, \ldots, n$ совпадают со столбцами Q_1 тех же номеров. Процесс продолжаем до тех пор, пока при некотором шаге m не получим совпадения рангов $r_m = r_{m+1}$.

Столбцы так построенной ортогональной матрицы Q_m естественным образом разбиваются на группы: $Q_m = [U_{r_m}, U_{r_{m-1},r_m}, \ldots, U_{r_1-r_2}, U_{n-r_1}]$.

Прежде чем перейти к перестройке построенного вспомогательного базиса в канонический отметим важное свойство его. Для определенности будем говорить о вспомогательном базисе первого процесса.

Обозначим через P_i подпространство корневых векторов, высоты которых не превосходят i. Тогда $P_1 \subset P_2 \subset \ldots \subset P_m$. Столбцы матрицы $V^{(i)}_{r_{i-1}-r_i}$, образуют базис подпространства P_i относительно пространства P_{i-1}. Для построения канонического базиса корневого подпространства следует построить векторы, образующие базис P_i относительно подпространства $P_{i-1} + P_i \cap \operatorname{im} \mathscr{A}$, где $\operatorname{im} \mathscr{A}$ образ оператора $\mathscr{A}$. Ясно, что такой базис можно построить, исходя из произвольного базиса P_i относительно P_{i-1}, отобрав среди векторов этого базиса (или среди их линейных комбинаций) максимальную систему векторов линейно-независимых относительно $\mathscr{A}$. С этой целью образуем матрицу $B_i = V^{(i)}_{\varrho i} - \pi V^{(i)}_{\varrho i}$ $(i = 1, \ldots, m,\ \varrho_i = r_{i-1} - r_i)$, π — матрица проектора пространства R_n на $\operatorname{im} \mathscr{A}$). Применяя к B_i нормализованный процесс, найдем векторы

$$\beta^{(i)}_t = (\beta_{r_i+1,t}, \ldots, \beta_{r_{i-1},t})^T, \qquad t = 1, 2, \ldots, \sigma_i\,,$$

составляющие базис образа оператора с матрицей B^T_i(σ_i — ранг B_i). Тогда векторы

$$x^{(i)}_t = \sum_{k=r_i+1}^{r_i-1} \beta_{kt} v^{(i)}_k \qquad (t = 1, \ldots, \sigma_i,\ V_{\varrho i} = [v_{r_i+1}, \ldots, v_{r_i-1}])$$

образуют систему векторов, порождающих «башни» в каноническом базисе высоты $i = 1, \ldots, m - 1$. Башня высоты m образуется столбцами матрицы $V^{(m)}_{r_{m-1}-r_m}$.

Литература

[1] Фаддеев, Д. К., Кублановская, В. Н., Фаддеева, В. Н.: Линейные алгебраические системы с прямоугольными матрицами. Современные численные методы. В. I. Материалы международной летней школы по численным методам, 16—75. Киев, (1966), Москва (1968).

[2] Кублановская, В. Н.: Нормализованная схема метода квадратного корня и ее применение к решению некоторых задач алгебры. Записки научных семинаров ЛОМИ АН СССР, 35, 56 (1973).

[3] Кублановская, В. Н.: О применении метода Ньютона к определению собственных значений λ-матриц. Докл. АН СССР, 188, 1004 (1969).

[4] Кублановская, В. Н.: Метод Ньютона для определения собственных значений и собственных векторов матриц. Ж. вычислит. матем. и матем. физ. I. (1972).

[5] Кублановская, В. Н.: К решению нелинейной проблемы собственных значений матрицы. Записки научных семинаров ЛОМИ АН СССР, 35, 67, (1973).

[6] Parlett, B. N.: Laguerre's Method Applied to the Matrix Eigenvalue Problem. Math. of Comput. 18, 464 (1964).

[7] Кублановская, В. Н.: Некоторые оценки для собственных значений положительно определенной матрицы, Ж. вычислит. матем. и матем. физ;, 5, 107 (1965).

[8] Кублановская, В. Н.: О некоторых алгорифмах для решения полной проблемы собственных значений. Ж. вычислит. матем. и матем. физ. 1, 554 (1961).
[9] Уилкинсон, Дж. Х.: Алгебраическая проблема собственных значений. Изд-во «Наука», Москва (1970).
[10] Кублановская, В. Н.: Об одном способе решения полной проблемы собственных значений вырожденной матрицы. Ж. вычислит. матем. и матем. физ., 6, 611 (1966).