

розв'язку, ефективні в тому випадку, коли є багато нульових коефіцієнтів або високий порядок системи (метод Гаусса ефективний до порядку 10^4 , ітераційні – до 10^6).

9.2.1.1 Прямі методи

До найбільш популярних прямих методів відносять метод Гаусса та його різновиди, метод Крамера (визначників), метод оберненої матриці, а також метод прогонки, що використовується в задачах з діагональними матрицями. Проте метод Крамера (визначників), детально розглянутий в стандартних курсах вищої математики, не може бути застосований в більшості практичних задач через велику складність розрахунку визначників навіть при невеликому зростанні порядку системи. Тому в цьому розділі буде зосереджено увагу на розгляді методу Гаусса, який, якщо й поступається ітераційним методам в певних практичних застосуваннях, все ж таки є найбільш універсальним, а також методу прогонки, що використовується в задачах з діагональними матрицями.

Метод Гаусса

Цей метод є одним з найпоширеніших методів розв'язання СЛАР. У його основі лежить ідея послідовного вилучення невідомих, що приводить вихідну систему до трикутного виду, у якому всі коефіцієнти нижче головної діагоналі дорівнюють нулю. Існують різні обчислювальні схеми, що реалізують цей метод. Найбільше поширення мають схеми з вибором головного елемента по рядку, по стовпцю, або по всій матриці.

Класичний метод Гаусса (метод виключення) ґрунтується на приведенні матриці коефіцієнтів системи (9.1) до трикутного вигляду:

$$\begin{pmatrix} * & * & * & \dots & * & * \\ 0 & * & * & \dots & * & * \\ 0 & 0 & * & \dots & * & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & * & * \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & * \end{pmatrix}$$

і складається з двох етапів: прямого ходу і зворотного підставлення. Етап прямого ходу закінчується, коли одне з рівнянь системи стає рівнянням з одним невідомим. Далі, здійснюючи зворотне підставлення, знаходять всі невідомі. З метою зменшення обчислювальної похибки використовують метод Гаусса з вибором головного елемента. Під головним елементом будемо розуміти максимальний за модулем елемент матриці A , обраний на заданій множині

Умови завершення прямого ходу методу Гаусса

При виконанні розрахунків може виникнути проблема: елемент $a_{k+1,k+1}^k = 0$. Ця ситуація виникає, коли всі елементи матриці A^k у рядках $i > k$ дорівнюють нулю. Система в цьому випадку має вигляд:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 + a_{12}^k x_2 + \dots + a_{1n}^k x_n = b_1^k \\ 0 + a_{22}^k x_2 + \dots + a_{2n}^k x_n = b_2^k \\ \dots \dots \dots \\ 0 + \dots 0x_{k-1} + a_{kk}^k x_k + \dots + a_{kn}^k x_n = b_k^k \\ 0 + \dots 0x_{k-1} + 0x_k + 0x_{k+1} + \dots + 0x_n = b_{k+1}^k \\ \dots \dots \dots \\ 0 + \dots 0x_{k-1} + 0x_k + 0x_{k+1} + \dots + 0x_n = b_n^k \end{array} \right. .$$

Застосування формул (9.3), (9.4) неможливе. В даному випадку система має нескінченну множину розв'язків, або не має їх зовсім. Це визначається з матриці B^k .

Якщо всі елементи $b_i^k = 0$ при $i \geq k+1$, то система має нескінченну множину розв'язків, причому корені x_1, \dots, x_k називаються залежними і виражають через значення x_{k+1}, \dots, x_n , які називають незалежними коренями.

Якщо хоч один елемент $b_i^k \neq 0$ при $i \geq k+1$, то розв'язків у системи немає.

У випадку, коли проблеми ділення на нуль не виникало і була отримана трикутна матриця A^n , система має єдиний розв'язок. Для його пошуку застосовується **зворотний хід методу Гаусса**:

$$\begin{aligned} x_n &= b_n^n \\ x_{n-i} &= b_{n-i}^n - \sum_{k=1}^i a_{n-k+1}^n \cdot x_{n-k+1}, \quad i = \overline{1, n-1} \end{aligned} \quad (9.5)$$

Кількість арифметичних операцій для реалізації методу

$$N \approx \frac{2}{3} n^3.$$

Алгоритм методу наведений на рис. 9.1

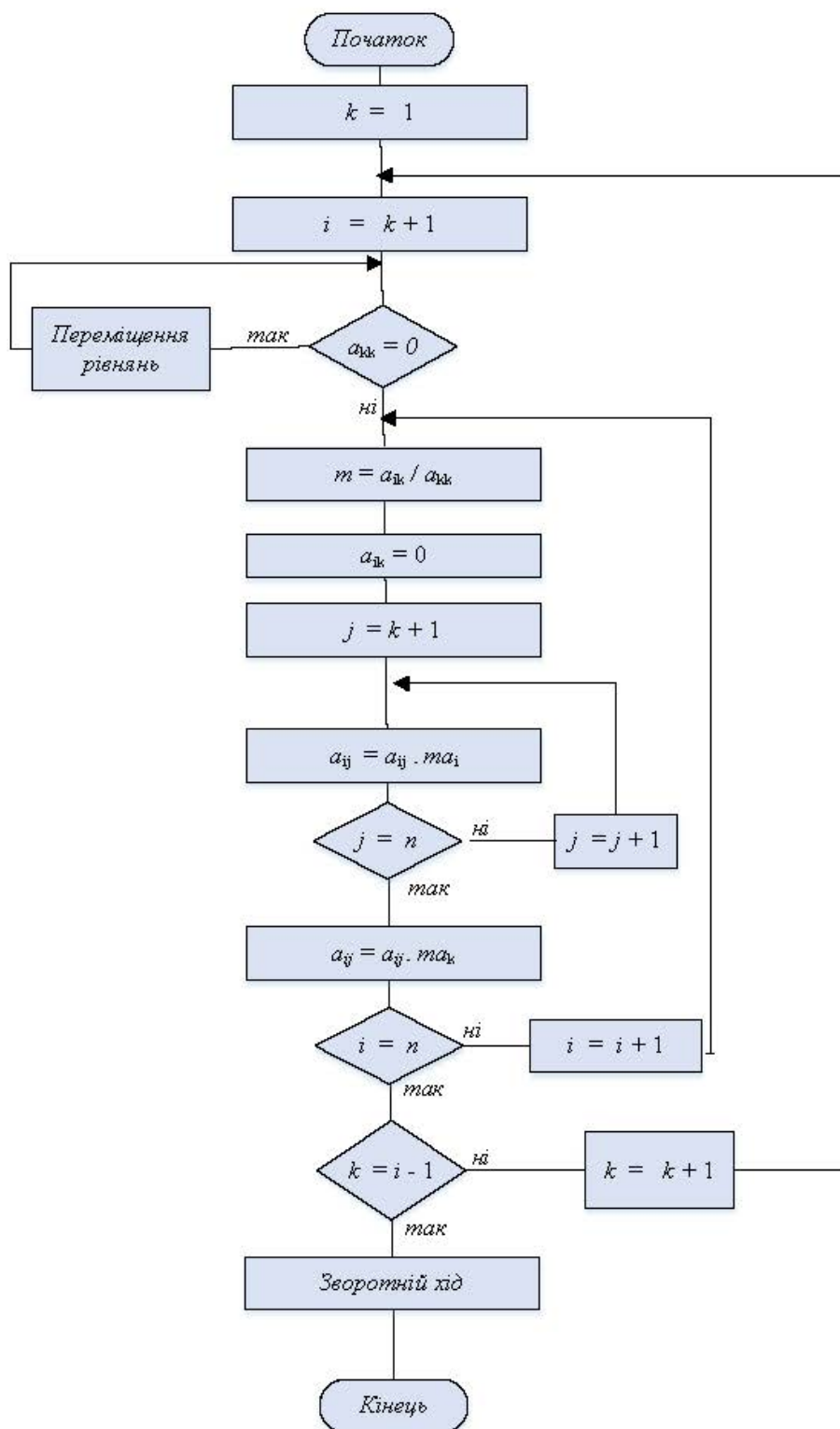


Рисунок 9.1 – Алгоритм методу Гаусса

Метод виключення Гаусса-Жордана

Цей метод дозволяє привести матрицю коефіцієнтів до діагонального вигляду. Єдиною його формальною відмінністю від попереднього методу є те, що замість $i > k$ підставляється $i \neq k$ (k -й рядок називається провідним). В методі Гаусса перетворення торкалися тільки рівнянь, що стоять нижче провідного рядка. Від класичного методу Гаусса цей метод відрізняється тим, що пронормований рядок віднімається не тільки від нижніх, а й від верхніх рівнянь системи, в результаті чого матриця A зводиться до одиничної. Зворотний хід в такому разі не потрібен, розв'язком системи буде стовпець B^n . Метод Гаусса-Жордана можна використовувати з вибором головного елемента чи без. Пошук головного елемента відбувається аналогічно попередньому методу. Формули (9.3), (9.4) з вказаними змінами будуть мати вигляд:

$$a_{ij}^{k+1} = \begin{cases} a_{ij}^k, & j \leq k \\ a_{k+1,j}^k / a_{k+1,k+1}^k, & i = k+1, j > k \\ a_{ij}^k - a_{k+1,j}^{k+1} \cdot a_{i,k+1}^k, & i \neq k+1, j > k \end{cases}, \quad (9.6)$$

$$b_i^{k+1} = \begin{cases} b_{k+1}^k / a_{k+1,k+1}^k, & i = k+1 \\ b_i^k - b_{k+1}^{k+1} \cdot a_{i,k+1}^k, & i \neq k+1 \end{cases}. \quad (9.7)$$

Цей метод полегшує одержання розв'язку, але супроводжується збільшенням обсягу обчислень.

Модифікований метод Гаусса

У багатьох випадках виникає необхідність розв'язання систем лінійних рівнянь із змінною матрицею коефіцієнтів і постійним стовпцем вільних членів. Найчастіше для розв'язання таких задач використовується модифікований метод Гаусса. В цьому методі матрицю коефіцієнтів A з матричного рівняння (9.1) подають у вигляді добутку лівої і правої трикутних матриць

$$L * R = A.$$

Оскільки діагональні елементи однієї з матриць дорівнюють одиниці, їх можна не запам'ятовувати, і обидві матриці зберігати в пам'яті ЕОМ на місці матриці коефіцієнтів.

У варіанті методу, що називається *методом Краута*, використовується така послідовність знаходження елементів матриць:

$$k = 1, 2, \dots, n;$$

$$l_{ik} = a_{ik} - \sum_{p=1}^{k-1} l_{ip} r_{pk}, \quad i = k, k+1, \dots, n;$$

$$l_{kk} = \frac{1}{l_{kk}},$$

$$r_{kj} = l_{kk}(a_{kj} - \sum_{p=1}^{k-1} l_{kp}r_{pj}), \quad j = k + 1, \dots, n;$$

$$r_{kk} = 1.$$

Система $AX = C$ зводиться до системи $LRX = C$, розв'язання якої замінюється розв'язанням двох систем з трикутними матрицями:

$$LY = C,$$

$$RX = Y.$$

Елементи Y, X знаходять з таких співвідношень:

$$y_1 = l_{11}c_1;$$

$$y_i = l_{ii}(c_i - \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip}y_p), \quad i = 2, \dots, n;$$

$$x_i = y_i - \sum_{p=i+1}^n r_{ip}x_p, \quad i = n-1, \dots, 1.$$

Число арифметичних операцій, необхідних для розв'язання цим методом системи лінійних алгебраїчних рівнянь, $N = 2n^2$.

Алгоритм модифікованого методу Гаусса наведено на рис. 9.2.

Застосування прямого ходу методу Гаусса для пошуку визначників

Для обчислення визначників матриць застосовують два підходи:

- рекурсивний розрахунок за допомогою розкладання за рядком чи стовпцем;
- обчислення на основі прямого ходу методу Гаусса.

Перший спосіб ґрунтується на використанні тієї властивості визначників, що визначник матриці дорівнює сумі добутків елементів будь-якого рядка чи стовпця на їх алгебраїчне доповнення, тобто:

$$\det(A) = \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot A_{ij}, \quad \forall i = \overline{1, n}.$$

Таким чином, обчислення одного визначника n -го порядку зводиться до розрахунку n визначників порядку $n-1$. Реалізується даний спосіб за допомогою рекурсії.

Рекурсивний спосіб зручно застосовувати до рядків чи стовпців, що мають велику кількість нульових елементів. Якщо ж нульових елементів у матриці немає або дуже мало, то застосування цього способу є вкрай неефективним. Для

визначника порядку n доведеться розрахувати $n!/2$ визначників другого порядку.

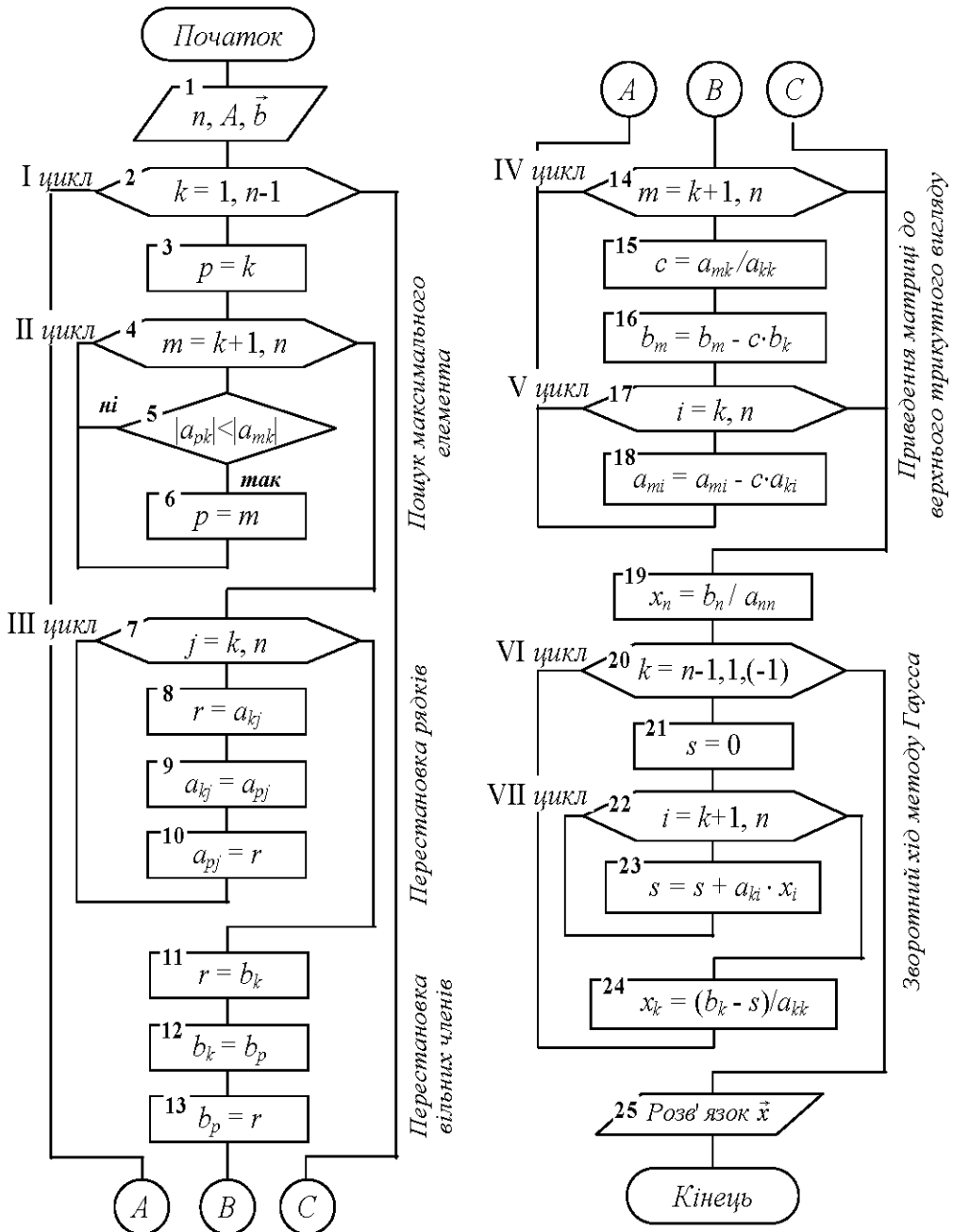


Рисунок 9.2 – Алгоритм модифікованого методу Гаусса

Метод, що базується на алгоритмі прямого ходу методу Гаусса, використовує властивість визначника трикутної матриці. Для такої матриці

визначник дорівнює добутку елементів головної діагоналі.

Для обчислення визначника використовується алгоритм побудови послідовності матриць $A \rightarrow A^1 \rightarrow A^2 \rightarrow \dots \rightarrow A^n$ прямого ходу методу Гаусса з тією відмінністю, що при перестановленні рядків чи стовпців знак визначника змінюється на протилежний. Значення визначника розраховується за формулою:

$$\det(A) = (-1)^m \cdot a_{11} \cdot a_{22}^1 \cdot \dots \cdot a_{nn}^{n-1},$$

де m – кількість перестановок.

Метод Крамера

Даний метод полягає у обчисленні визначника $\det(A)$ матриці A , а також визначників $\det(A_k)$ матриць A_k , $k = \overline{1, n}$. Матриці A_k отримуються з матриці A шляхом заміни k -го стовпця на стовпець B .

Можливі варіанти:

1. Якщо $\det A \neq 0$, то система має єдиний розв'язок $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n)$, який знаходиться за формулою:

$$x_k = \frac{\det(A_k)}{\det(A)}; \quad k = \overline{1, n}.$$

2. Якщо $\det(A) = 0$ та всі $\det(A_k) = 0$, $k = \overline{1, n}$, то розв'язків у системи нескінченна множина.

3. Якщо $\det(A) = 0$ і хоча б один $\det(A_k) \neq 0$, то система розв'язків не має.

Метод Крамера (визначників) може уповільнювати розв'язання практичних задач через велику складність розрахунку визначників навіть при невеликому зростанні порядку системи.

Метод оберненої матриці

Якщо задача розв'язання СЛАР вирішується у пакеті прикладних програм, в якому реалізована функція обчислення оберненої матриці, то для пошуку розв'язку можна застосовувати формулу:

$$X = A^{-1}B,$$

де A^{-1} – обернена матриця.

Нагадаємо визначення оберненої матриці. Оберненою до квадратної матриці A називається така матриця A^{-1} , для якої виконується співвідношення:

$$A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = E,$$

де E – одинична матриця.

$$u_i = -\frac{c_i}{a_i u_{i-1} + b_i},$$

$$v_i = \frac{\varphi_i - a_i v_{i-1}}{a_i u_{i-1} + b_i}$$

і далі

$$y_n = v_n,$$

$$y_i = u_i y_{i+1} + v_i, \quad i = n-1, \dots, 1, 0.$$

9.2.1.2 Ітераційні методи

Ітераційні методи особливо ефективні при високому порядку системи. Вони застосовуються в системах, попередньо приведених до вигляду:

$$\begin{cases} x_1 = b_{1,n}x_n + b_{1,n-1}x_{n-1} + \dots + b_{1,1}x_1 + b_{1,0}, \\ x_2 = b_{2,n}x_n + b_{2,n-1}x_{n-1} + \dots + b_{2,1}x_1 + b_{2,0}, \\ \dots \\ x_n = b_{n,n}x_n + b_{n,n-1}x_{n-1} + \dots + b_{n,1}x_1 + b_{n,0}. \end{cases} \quad (9.8)$$

або в матричній формі: $X = BX + B_0$,

$$\text{де } B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} \end{bmatrix},$$

$$B_0 = \begin{bmatrix} b_{10} \\ b_{20} \\ \vdots \\ b_{n0} \end{bmatrix}.$$

Існує декілька основних різновидів ітераційних методів. Це методи Якобі (простої ітерації), Гаусса–Зейделя і послідовної верхньої релаксації, в основі яких лежить систематичне уточнення значень змінних, заданих на початку розрахунку.

В методі Якобі початкові значення змінних використовуються для обчислення нових значень x_1, x_2, \dots, x_n за допомогою наведених нижче рівнянь. Процес припиняється, коли всі нові значення виявляються достатньо близькими до попередніх. В іншому випадку нові значення використовуються замість початкових. Ця процедура повторюється доти, доки не буде досягнута збіжність

або стане зрозуміло ясно, що процес розбігається. В цьому методі заміна значень всіх змінних проводиться одночасно (одночасний зсув).

Система ітераційних рівнянь має вигляд:

$$\begin{cases} x_1^{(m+1)} = b_{11}x_1^{(m)} + b_{12}x_2^{(m)} + b_{13}x_3^{(m)} + \dots + b_{1n}x_n^{(m)} + b_{10}, \\ x_2^{(m+1)} = b_{21}x_1^{(m)} + b_{22}x_2^{(m)} + b_{23}x_3^{(m)} + \dots + b_{2n}x_n^{(m)} + b_{20}, \\ \vdots \\ x_n^{(m+1)} = b_{n1}x_1^{(m)} + b_{n2}x_2^{(m)} + b_{n3}x_3^{(m)} + \dots + b_{nn}x_n^{(m)} + b_{n0}; \end{cases}$$

де $x_i^{(m+1)}, x_i^{(m)}$, відповідно, значення, x_i ($i=1, \dots, n$) на наступній $(m+1)$ і попередній (m) ітераціях.

В методі Гаусса–Зейделя уточнене значення x_1 відразу ж використовується для обчислення x_2 . Потім за новими значеннями x_1 і x_2 визначаються x_3 і т. д. Це дозволяє істотно збільшити швидкість збіжності.

В методі послідовної верхньої релаксації нові значення кожної змінної обчислюються як:

$$x_i^{(m+1)} = x_i^{(m)} + \omega(\bar{x}_i^{(m+1)} - x_i^{(m)}),$$

де $\bar{x}_i^{(m+1)}$ – уточнене значення $x_i^{(m)}$ за методом Гаусса–Зейделя; ω – параметр релаксації ($1 \leq \omega \leq 2$).

При $\omega=1$ цей метод подібний до методу Гаусса–Зейделя. Швидкість збіжності залежить від ω .

Одним з головних питань щодо застосування ітераційних методів є збіжність. Для оцінювання збіжності обчислюються норми матриці коефіцієнтів $\|B\|$ з системи (9.2).

Найбільшого поширення набули такі способи оцінювання норм:

$$\text{I норма : } \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |b_{ij}|,$$

$$\text{II норма : } \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |b_{ij}|,$$

$$\text{E-норма (Евклідова) : } \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n b_{ij}^2}.$$

Існує декілька підходів до визначення збіжності за допомогою оцінки норм. В загальному випадку достатньо, щоб хоча б одна з норм матриці B була

менша за одиницю

$$\|B\| < 1.$$

В математиці називають таку умову “звичайною” або “сильною”. В багатьох випадках збіжність забезпечується і при виконанні так званої “слабкої” ознаки. Наприклад, “слабка” ознака сум для рядків: для всіх сум коефіцієнтів рядків ($i = 1, \dots, n$) виконується співвідношення:

$$\sum_{j=i}^n b_{ij} \leq 1,$$

але є один рядок p для якого

$$\sum_{j=i}^n b_{pj} < 1.$$

Аналогічно визначається “слабка” ознака сум для стовпців.

“Слабка” ознака може використовуватися в тих випадках, коли матриця коефіцієнтів A системи рівнянь (9.1) є нерозкладна, тобто це квадратна матриця A , яку (на відміну від розкладної) не можна привести до вигляду:

$$\begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ 0 & A_3 \end{pmatrix},$$

де A_1, A_3 – квадратні матриці.

Для розкладних матриць система рівнянь (9.1) розпадається на дві системи рівнянь, що розв’язуються послідовно. В більш детальних підручниках, список яких наведено в кінці цієї книги, міститься багато більш детальних доведень і аналіз властивостей та ознак для оцінювання збіжності, але для загальноінженерного підходу до багатьох практичних задач достатньо даних, що наведені вище.

9.2.1.3 Загальні висновки щодо застосування методів розв’язання систем лінійних рівнянь

При невеликих порядках системи (до 10-15) можна використовувати метод Крамера, який дозволяє отримати точний розв’язок і при таких порядках не потребує надто великої кількості обчислювальних операцій.

Такі задачі часто виникають при розрахунках невеликих електричних мереж чи підсистем автоматичного управління. Але зі зростанням кількості рівнянь в системі дуже швидко починає зростати і кількість операцій на обчислення визначників матриць, що призводить до спадання ефективності методу. Вже починаючи за 9-10-го порядку системи рівнянь метод Гаусса та його модифікації мають переваги; і взагалі є найбільш надійними методами. Але якщо матриці коефіцієнтів дуже розріджені, тобто містять багато нулів,

реалізація методу Гаусса починає потребувати великих обчислювальних витрат на зміну порядку рядків матриць, щоб забезпечити ненульове значення елемента, який видаляється на певному кроці. Задачі з розрідженими матрицями якраз і виникають в багатьох випадках проведення розрахунків у задачах математичної фізики, в яких для забезпечення точності проводиться достатньо щільна дискретизація з невеликим кроком. Взагалі для задач розв'язання систем рівнянь великого порядку (десятки, сотні, тисячі...) ітераційні методи не мають конкурентів, але лише у випадку забезпечення збіжності. Слід відзначити, що у багатьох практичних задачах збіжність забезпечується самою постановкою задачі (приклад можна знайти у відповідних розділах цього підручника, де розглянуто розв'язання диференціальних рівнянь в частинних похідних).

9.2.2 Визначення власних значень матриць

Багато задач моделювання зводиться до розгляду систем рівнянь, що мають єдиний розв'язок лише в тому разі, якщо відомо значення деякого внутрішнього параметра. Цей особливий параметр називають характеристичним або власним параметром (значенням) системи. При аналізі автоматичних систем власні значення дозволяють визначити критичні параметри керувальних впливів, перевищення яких призводить до втрати системою стійкості. При динамічному аналізі механічних або радіоелектронних систем з самозбудженням власні значення відповідають резонансним частотам коливань, а власні вектори характеризують амплітуди цих коливань.

Формулювання проблеми.

Знайти n скалярних значень λ і власних векторів X , що задовольняють матричне рівняння

$$AX = \lambda X. \quad (9.9)$$

Разом з звичайною задачею власних значень існує так звана узагальнена задача власних значень (задача для двох матриць A і F):

$$AX = \lambda FX.$$

Тут ми розглянемо тільки задачу, яка впливає з рівняння (9.9).

Згадаємо деякі означення з теорії матриць:

– квадратна матриця A називається особливою (сингулярною), якщо

$$\det A = 0;$$

– матриця A називається ортогональною, якщо

$$A^T A = E,$$

тобто $A^{-1} = A^T$, де T – знак транспонування;

– матриці A і B подібні, якщо існує така несингулярна матриця P , що

справедливо співвідношення

$$B = P^{-1}AP.$$

Доцільно перед аналізом методів визначення власних значень зупинитись на властивостях власних значень і векторів:

1. Всі n власних значень симетричної матриці розміру $n * n$, що складається з дійсних чисел, дійсні;

2. Якщо власні значення матриці різні, то її власні вектори ортогональні. Сукупність n лінійно незалежних власних векторів складає базис простору, що розглядається. Тому для сукупності лінійно незалежних векторів x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) будь-який вектор в тому ж просторі можна виразити через власні вектори;

3. Якщо дві матриці подібні, то їх власні значення збігаються. З подібності A і B випливає, що $B = P^{-1}AP$, оскільки $AX = \lambda X \Rightarrow P^{-1}AX = \lambda P^{-1}X$. Якщо прийняти $X = PY$, тоді $P^{-1}APY = \lambda Y$, тобто A і B не тільки мають однакові λ , але й їх власні вектори зв'язані співвідношенням $X = PY$;

4. Добуток власного вектора матриці на скаляр є власним вектором тієї ж матриці. Як правило, власні вектори нормалізують, розділивши їх на найбільший елемент або на суму квадратів елементів.

9.2.2.1 Методи обчислення власних значень

Вибір найбільш ефективного методу визначення власних значень або власних векторів для заданої задачі залежить від ряду факторів (тип рівнянь, число і характер власних значень, вигляд матриці і т. д.). Алгоритми визначення власних значень можна розподілити на 3 групи:

- прямі, основані на розкритті характеристичних (вікових) визначників $\det(A - \lambda E) = 0$ і розв'язанні характеристичних рівнянь;
- ітераційні, основані на багатократному застосуванні ітераційного алгоритму, який наближає власний вектор, що одержується в кожному циклі, до точного розв'язку;
- перетворення подібності, які використовують властивості подібних матриць, що мають однакові власні значення і ортогональні власні вектори.

Прямі методи

Найбільш очевидним шляхом розв'язання задач на власні значення є їх визначення з системи рівнянь, яка має ненульовий розв'язок лише в разі, коли $\det(A - \lambda E) = 0$.

Розв'язання в цьому випадку складається з двох етапів:

- розгорнення визначника безпосередньо або одним з відомих методів: Данілевського, Крилова, Левер'є, невизначених коефіцієнтів, інтерполювання і т. д.;

– розв’язання одержаного характеристичного рівняння, корені якого і будуть власними значеннями матриці. Для визначення коренів можна використати один з методів розв’язання нелінійних алгебраїчних рівнянь (розділ 3).

В таблиці 9.1 наведені результати порівняння ефективності різних методів розгорнення визначників, де критерієм є кількість обчислювальних операцій, а в таблиці 9.2 – порівняння методів розв’язання з точки зору складності, точності та швидкості збігання. Більш детальний опис цих методів можна знайти в підручниках, список яких наведено в кінці книги.

Таблиця 9.1 – Кількість дій, що використовуються різними методами розгорнення визначника залежно від його порядку

Метод	Порядок матриці									
	3		4		5		7		9	
	Множення-ділення (М-Д)	Додавання-віднімання (Д-В)	М-Д	Д-В	М-Д	Д-В	М-Д	Д-В	М-Д	Д-В
Безпосереднього розгорнення	12	10	60	46	320	238	13692	10078	986400	725758
Данілевського	14	12	42	36	92	80	282	252	632	576
Крилова	67	38	179	118	389	280	1287	1022	3209	2688
Левеґ’є	41	27	153	114	414	330	1791	1533	5228	4644
Невизначених коефіцієнтів	67	41	171	116	364	265	1189	945	2966	2481
Інтерполяції	46	38	125	102	279	230	972	826	2525	2202

Ітераційні методи

Ітераційні методи (Iteration methods) основані на багатократному використанні ітераційного алгоритму, що наближає власний вектор, який одержується в кожному циклі, до точного розв’язку.

Розрахунок починається з початкового нормованого вектора $X^{(0)}$, який множиться зліва на матрицю A , і результат дорівнює добутку постійної (власне значення λ) і нормованого вектора $X^{(1)}$:

$$AX^{(0)} = \lambda X^{(1)}.$$

Таблиця 9.2 – Вибір алгоритму розв'язання задачі на власні значення

Назва алгоритму	Застосовується для матриць	Результат	Рекомендується для пошуку власних значень			Примітка
			Max або min	Всі $x < 6$	Всі $x \geq 6$	
Визначник (ітерація)	Загального вигляду	Власні значення		x		Потребує знаходження коренів полінома загального вигляду
Ітерація (ітерація)	Загального вигляду	Власні значення і власні вектори	x	x	x	Забезпечує найкращу точність для найбільшого і найменшого власних значень
Метод Якобі (перетворення)	Симетричних	Діагональна форма матриці		x	x	Теоретично потребує нескінченного числа кроків
Метод Гівенса (перетворення)	Симетричних	Тридіагональна форма матриці		x	x	Потребує знання коренів простого полінома
	Несиметричних	Форма Гессенберга		x	x	Потребує застосування додаткового методу
Метод Хаусхолдера (перетворення)	Симетричних	Тридіагональна форма матриці		x	x	Потребує знання коренів простого полінома
Метод LR (перетворення)	Загального вигляду	Квазидіагональна форма матриці		x	x	Буває нестійкий
Метод QR (перетворення)	Загального вигляду	Квазидіагональна форма матриці		x	X	Найкращий метод, що має найбільшу узагальненість

Якщо вектор $X^{(1)}$ збігається з $X^{(0)}$, то розрахунок припиняється.

Інакше вектор $X^{(1)}$ використовується як початковий, і всі обчислення повторюються доти, доки $|X_i^{(n)} - X_i^{(n-1)}| \leq \varepsilon$, де $X^{(n)} \in \{x_i^{(n)}\}$ і $X^{(n-1)} \in \{x_i^{(n-1)}\}$ – вектори, що одержані в $n-1$ і n ітераційних циклах, а ε – задана припустима похибка обчислень.

Якщо процес збігається, одержаний постійний множник відповідає найбільшому власному значенню λ_{\max} , а нормований вектор – відповідному власному вектору.

Аналогічно можна знайти найменше власне значення. Для цього початкова система рівнянь попередньо множиться на обернену матрицю A^{-1} :

$$A^{-1}AX = \lambda A^{-1}X,$$

звідки одержуємо $\frac{1}{\lambda}X = A^{-1}X$.

Подальше розв'язання задачі на власні значення за аналогічним викладеному вище алгоритмом приводить до максимального власного значення $\lambda_{\max}^* = \frac{1}{\lambda_{\min}}$, за яким знаходиться найменше власне значення λ_{\min} .

Визначивши максимальне або мінімальне власне значення, можна знайти наступні за ним за величиною, замінивши вихідну матрицю матрицею, яка містить лише решту власних значень.

Принцип ортогональності власних векторів $X_i^T X_j = 0$ при $i \neq j$ і $X_i^T X_i = 1$ при $i = j$ дозволяє довести твердження, що якщо створити нову матрицю $A^* = A - \lambda_1 X_1 X_1^T$, то вона буде мати власне значення $\lambda_1 = 0$, а всі решта її власних значень будуть збігатися з власними значеннями вихідної матриці A . В результаті знаходимо λ_2 і далі, утворюючи A^{**} і т. д., аналогічно визначаємо всі власні значення і вектори.

Методи перетворень подібності

Методи перетворень подібності оснований на властивостях подібних матриць, які мають однакові власні значення і ортогональні власні вектори.

Ці методи використовуються для одержання з вихідної матриці нової, подібної до неї, але простішого вигляду. Очевидно, найкращим спрощенням було б приведення матриці до діагонального (або блоково-діагонального) вигляду. В цьому випадку власні значення відповідали б елементам матриці, що стоять на головній діагоналі (в випадку дійсних власних значень), або просто визначались би з квадратних матриць розміру 2×2 (в випадку комплексних), що стоять на головній діагоналі. Приведення до діагонального вигляду часто важко здійснити, тому в результаті більшість методів приводить матрицю до

тридіагонального вигляду, для якого існують достатньо добре досліджені і відпрацьовані на практиці методи знаходження власних значень. Як приклад можна навести метод, що приводить до послідовності Штурма і має таку властивість, що корені полінома i -го порядку розташовуються між коренями поліномів $(i+1)$ -го порядку (це значно спрощує їх визначення, оскільки обмежує ділянки відокремлення коренів). Вихідний визначник тридіагональної матриці

$$\det(A - \lambda E) = \begin{vmatrix} a_1 - \lambda & b_2 & & & \\ b_2 & a_2 - \lambda & & & \\ & & \dots & & \\ & & & a_{n-1} - \lambda & b_n \\ 0 & & & b_n & a_n - \lambda \end{vmatrix}$$

може бути поданий послідовністю поліномів Штурма

$$f_m(\lambda) = (a_m - \lambda)f_{m-1}(\lambda) - b_m^2 f_{m-2}(\lambda),$$

за умови $f_0(\lambda) = 1$ і $f_1(\lambda) = a_1 - \lambda$.

Приймаючи $m = 2, \dots, n$ і послідовно визначаючи корені, знаходимо власні значення як корені полінома n порядку.

Якщо в разі симетричних матриць ефективним способом знаходження власних значень є приведення матриці до тридіагонального вигляду, то для симетричних матриць доцільно користуватися методами перетворення подібності для приведення вихідної матриці до вигляду Гессенберга:

$$\begin{vmatrix} * & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & * & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 \\ * & * & * & * & * \end{vmatrix}$$

Для приведення матриць до тридіагонального вигляду (або вигляду Гессенберга) існує ряд методів, найбільш відомими з яких є методи Якобі, Гівенса, Хаусхолдера, які докладно розглядаються в спеціальній літературі. Переваги має (з точки зору швидкодії і кількості обчислювальних операцій) метод відображень, що запропонований Хаусхолдером. Цей метод дозволяє при виконанні одного кроку перетворень перетворити в нуль одразу всі елементи цілого рядка і стовпця, що стоять зовні трьох діагоналей, в той час як в методі Гівенса на кожному k -му кроці для цього необхідно зробити $(n^2 - 3n + 2)/2$ перетворень, а в методі Якобі створення нового нульового елемента може

супроводжуватись його зникненням в іншому місці матриці, тобто не гарантовано одержання результату за кінцеву кількість кроків.

Найбільш загальними з методів перетворень подібності є методи LR і QR , що ґрунтуються на поданні матриці A у вигляді добутків $A=LR$ і $A=QR$, де L – ліва трикутна матриця з одиничними діагональними елементами; R – права трикутна матриця; Q – ортогональна матриця.

Далі, застосовуючи перетворення подібності

$$A^* = L^{-1}AL = L^{-1}(LR)L = RL,$$

$$A^* = Q^T AL = Q^T(QR)Q = RQ,$$

одержуємо послідовність матриць, яка прямує до квазідіагонального вигляду.

9.2.2.2 Порівняння методів визначення власних значень

Основними критеріями, що дозволяють оцінити ефективність методів знаходження власних значень стосовно їх алгоритмізації і використання для розв'язання задач на комп'ютерах, є точність, швидкодія (кількість обчислювальних операцій) і необхідний розмір пам'яті.

Швидкодія методу залежить від двох складових: кількості операцій в єдиному циклі і кількості циклів, необхідних для одержання результату.

Важливим критерієм оцінювання методів визначення власних значень є їх загальність (універсальність), тобто пристосованість до матриць різних виглядів, незалежно від симетрії і вигляду елементів (дійсні або комплексні).

Проаналізуємо з точки зору цих критеріїв методи знаходження власних значень.

Прямі методи приводять до необхідності розв'язання нелінійних алгебраїчних рівнянь. Методи їх розв'язання достатньо добре розроблені. Але в задачах на власні значення часто зустрічаються кратні корені, при цьому ітераційні методи не гарантують одержання розв'язку. Швидкодія цих методів різко зменшується при підвищенні порядку матриці внаслідок зростання кількості операцій для обчислення визначника.

Ці недоліки ускладнюють використання прямих методів знаходження власних значень для великих матриць (порядку більше 10).

Істотним недоліком ітераційних методів розв'язання задач знаходження власних значень є накопичення помилок при кожному кроці ітераційного процесу (при визначенні максимального значення, створенні нової матриці і т. д.), тому практично ними можна користуватися для визначення не більше трьох-чотирьох власних значень.

В інших випадках доцільно користуватись методами перетворення подібності.

Найбільш ефективні методи перетворення подібності гарантують одержання результату при достатньо високій точності розв'язання. Часто

найефективніше розв'язання задачі забезпечується при одночасному використанні декількох методів перетворення подібності. Наприклад, методом Хаусхолдера матриця приводиться до вигляду Гессенберга, а потім методом QR визначаються власні значення.

Таким чином, вибір найбільш зручного алгоритму для розв'язання різних задач знаходження власних значень визначається типом власних значень, виглядом матриці і кількістю шуканих власних значень. Чим складніша задача, тим менше методів та алгоритмів, з яких можна вибирати. Найбільш універсальний алгоритм QR , але він і один з найскладніших. При малих порядках матриці $n < 3 \dots 5$ можна користуватись найпростішими прямими та ітераційними методами, а при збільшенні порядку і ускладненні вигляду матриці рекомендуються лише методи перетворення подібності. Таблиця 9.2 дозволяє полегшити вибір методу розв'язання задачі на власні значення. Звичайно пакети математичного забезпечення ЕОМ містять програми, в яких використовується більшість з цих алгоритмів. Одним з ефективних засобів використання наявних ресурсів ЕОМ є одночасне застосування двох підпрограм, що дозволяє поєднати їх найкращі якості.