

CURS 4

METODE NUMERICE PENTRU PROBLEMA DE VALORI PROPRII

Partea I

1. Definiții, proprietăți.
2. Metoda puterii și variante ale acesteia. Metoda iterațiilor simultane.
3. Metoda Jacobi.

1 Valori și vectori proprii**1.1 Valori și vectori proprii. Polinom caracteristic. Subspațiu propriu.**

Fie dată matricea \mathbf{A} $n \times n$, reală sau complexă.

Definiție

Dacă vectorul $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ și scalarul λ satisfac relația

$$\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}, \quad (1)$$

atunci: λ se numește *valoare proprie*, iar \mathbf{x} *vectorul propriu* asociat lui λ ■

Dacă \mathbf{x} și \mathbf{y} sunt asociați cu λ , atunci și $\alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y}$, α, β scalari, este asociat lui λ .

Dacă \mathbf{P} este o matrice $n \times n$ nesingulară, matricea

$$\mathbf{B} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{AP}$$

se zice *similară* cu \mathbf{A} . \mathbf{P} se zice matrice de transformare.

Propoziție

- Matricile similare au aceleași valori proprii.
- Dacă \mathbf{y} sunt vectorii proprii ai lui \mathbf{B} , vectorii proprii \mathbf{x} ai lui \mathbf{A} se găsesc din relația $\mathbf{x} = \mathbf{Py}$.

■

Într-adevăr: dacă $\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$, rezultă $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}$, sau $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{AP}(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}) = \lambda(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{x})$; cu

$\mathbf{y} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{x}$, rezultă $\mathbf{By} = \lambda\mathbf{y}$.

Mai multe metode numerice transformă matricea \mathbf{A} într-o matrice similară \mathbf{B} , de o formă mai simplă, determinând valorile proprii și vectorii proprii ai matricii \mathbf{B} ; apoi, se determină vectorii proprii ai lui \mathbf{A} , cu relația de mai sus.

Polinomul caracteristic

Relația (1) este ecuația din care se găsesc λ și \mathbf{x} . Aceasta se mai scrie

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (2)$$

unde \mathbf{I} este matricea unitate. Explicit,

$$\begin{bmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} - \lambda \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2')$$

Condiția ca (2) să aibă soluții netriviiale \mathbf{x} , este $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0$. Explicit,

$$p(\lambda) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (3)$$

$p(\lambda)$ se zice *polinomul caracteristic* al matricii \mathbf{A} , iar $p(\lambda) = 0$ – *ecuația caracteristică*.

Fie determinantul dezvoltat:

$$p(\lambda) = (-1)^n \lambda^n + c_1 \lambda^{n-1} + \dots + c_{n-1} \lambda + c_n \quad (3')$$

Din (3, 3') și relațiile între coeficienți și rădăcini, rezultă următoarele proprietăți ale coeficienților și valorilor proprii:

1) Avem $p(0) = c_n$, și din determinant $p(0) = \det(\mathbf{A})$; urmează

$$c_n = \det(\mathbf{A})$$

Pe de altă parte, $\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n = c_n$, și astfel $\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n = \det(\mathbf{A})$.

2) Coeficientul lui λ^{n-1} se găsește din termenul

$$(a_{11} - \lambda) \dots (a_{nn} - \lambda) = (-\lambda)^n + \left(\sum_{i=1}^n a_{ii} \right) (-\lambda)^{n-1} + \dots \text{ Astfel, rezultă:}$$

$$c_1 = (-1)^{n-1} \sum_1^n a_{ii} ;$$

Pe de altă parte, din relațiile între coeficienți și rădăcini avem

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = -\frac{c_1}{(-1)^n} . \text{ În consecință, rezultă}$$

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = \sum_1^n a_{ii} .$$

Observație: $Tr(\mathbf{A}) = \sum_1^n a_{ii}$ se zice *urma matricii A*.

3) În general:

$$c_i = (-1)^{n-i} \times \text{Suma minorilor principali de ordinul } i \text{ ai matricii } \mathbf{A} .$$

Observații

1) Ordonarea valorilor proprii:

Valorile proprii se ordonează în șirul $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. În acest șir, o rădăcină multiplă de ordinul r , se repetă de r ori. Uzual, valorile proprii se indexează în ordinea descrescătoare a modulului, adică $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|$. Valoarea proprie λ_1 se zice *dominantă*. Mulțimea valorilor proprii $\{\lambda_i, i = \overline{1, n}\}$ se zice *spectrul matricii A*.

2) Vectorii proprii asociați unei valori proprii:

După determinarea valorilor proprii, vectorii proprii asociați cu λ_i se găsesc punând $\lambda = \lambda_i$ în (2'), și rezolvând sistemul liniar și omogen (2').

- Dacă \mathbf{A} este reală: În general, λ_i poate fi complex, și atunci vectorul propriu \mathbf{x}_i asociat cu λ_i este complex. Dacă \mathbf{A} și λ_i sunt reali, atunci vectorul propriu \mathbf{x}_i este real.
- Dacă \mathbf{A} este complexă: În general, valorile proprii și vectorii proprii sunt mărimi complexe. În particular, unele dintre acestea pot fi și reale. ■

Subspațiu propriu și dimensiunea acestuia

Sistemul (2') este omogen, astfel că dacă \mathbf{x} , \mathbf{y} sunt soluții, atunci $\alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{y}$ sunt soluții.

Adică, lui λ_i îi este asociat un subspațiu liniar S_i de soluții \mathbf{x} . Se arată că:

Dimensiunea subspațiului S_i este *mai mică decât sau egală cu* ordinul de multiplicitate a rădăcinii λ_i ■

Dacă r_i este ordinul de multiplicitate a rădăcinii λ_i și p_i dimensiunea lui S_i , avem $p_i \leq r_i$. Adică, în S_i există cel mult r_i vectori liniar independenți.

Dacă $p_i < r_i$, valoarea λ_i se zice *defectivă*; în acest caz, și matricea \mathbf{A} se zice *defectivă*.

(r_i se mai zice *multiplicitate algebrică*, iar p_i *multiplicitate geometrică*.)

3) Determinarea efectivă a sistemului propriu:

Pentru calculația practică ($n > 3$), *nu se recomandă*:

- *Calculul direct al valorilor proprii*, prin rezolvarea ecuației caracteristice (3').
Aceasta, datorită faptului că problema calculului rădăcinilor unui polinom este foarte sensibilă la mici perturbații în coeficienți (aceste perturbații apar din erorile de rotunjire).
- *Calculul direct al vectorilor proprii*, din sistemul (2').

Metode numerice pentru găsirea valorilor proprii λ_i , și a vectorilor proprii asociați $\mathbf{x}^{(i)}$, sunt prezentate în continuare.

■

Exemplu-1

Fie matricea:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$

Polinomul caracteristic este:

$$\begin{bmatrix} 1 - \lambda & 2 & 3 \\ 2 & 3 - \lambda & 4 \\ 3 & 4 & 5 - \lambda \end{bmatrix} = 0$$

Sau cf. (3')

$$p(\lambda) = -\lambda^3 + c_1\lambda^2 + c_2\lambda + c_3 = 0,$$

unde:

$$c_3 = \det(\mathbf{A}) = 1 \cdot (-1) - 2 \cdot (-2) + 3 \cdot (-1) = 0$$

$$c_1 = (-1)^2(1 + 3 + 5) = 9$$

$$c_2 = (-1)^1 \left(\begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 5 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 3 & 4 \\ 4 & 5 \end{vmatrix} \right) = -(-1 - 4 - 1) = 6$$

$$p(\lambda) = -\lambda^3 + 9\lambda^2 + 6\lambda = 0$$

De unde:

$$\lambda = 0$$

$$\lambda^2 - 9\lambda - 6 = 0; \lambda = \frac{9 \pm \sqrt{105}}{2} = -0.623475383; 9.62347538$$

Ordonând (descrescător, după module):

$$\lambda_1 = 9.62347538$$

$$\lambda_2 = -0.623475383$$

$$\lambda_3 = 0$$

Vectorii proprii $\mathbf{x}^{(i)} = \begin{bmatrix} x_1^{(i)} \\ x_2^{(i)} \\ x_3^{(i)} \end{bmatrix}$, $i = 1, 2, 3$ se determină din sistemul omogen

$$\begin{bmatrix} 1 - \lambda & 2 & 3 \\ 2 & 3 - \lambda & 4 \\ 3 & 4 & 5 - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

în care se înlocuiește $\lambda = \lambda_i$.

De exemplu, vectorul propriu nr. 1 se găsește din sistemul:

$$\begin{bmatrix} -8.62347538 & 2 & 3 \\ 2 & -6.62347538 & 4 \\ 3 & 4 & -4.62347538 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Una dintre coordonate rămâne arbitrară: să alegem de ex., $x_1 = 1$, rezultă

$$2x_2 + 3x_3 = 8.62347538$$

$$4x_2 - 4.62347538x_3 = -3$$

Rezultă (rezolvând în simplă precizie):

$$\mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1.0 \\ 1.452934 \\ 1.905869 \end{bmatrix}$$

Orice vector $\alpha \mathbf{x}^{(1)}$ unde $\alpha = \text{real}$, face funcție de vector propriu nr. 1.

Analog, se determină vectorii proprii nr. 2 și 3.

■

1.2 Matrici hermitiene și unitare

Operația * aplicată unui vector sau unei matrici notează *transpus-conjugata*. Astfel:

- Dacă \mathbf{x} este un vector, $\mathbf{x}^* = \bar{\mathbf{x}}^T$.
- Dacă \mathbf{A} , este o matrice, $\mathbf{A}^* = \bar{\mathbf{A}}^T$.

$$\text{Explicít: } \mathbf{A} = [a_{ij}], \mathbf{A}^* = [a_{ij}^*], \text{avem: } a_{ij}^* = \bar{a}_{ji}.$$

În expresiile anterioare, bara notează conjugata: $\bar{\mathbf{x}} = [\bar{x}_i]$; $\bar{\mathbf{A}} = [\bar{a}_{ij}]$.

Pentru un vector real, sau o matrice reală, operația * revine la transpunere:

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^T; \quad \mathbf{A}^* = \mathbf{A}^T.$$

În particular, pentru un scalar, operația revine la conjugare: $s^* = \bar{s}$.

Matrici hermitiene:

$$\text{Matricea } \mathbf{A} \text{ se zice } \textit{hermitiană}, \text{ dacă } \mathbf{A}^* = \mathbf{A} \quad \blacksquare$$

Exemplu de matrice hermitiană:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1-7i & -i \\ 1+7i & 5 & 10-3i \\ i & 10+3i & -2 \end{bmatrix}$$

Remarcați că elementele diagonale sunt reale, iar elementele simetrice sunt conjugate ■

O matrice reală este hermitiană, dacă este simetrică ($\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$).

O matrice hermitiană se zice *pozitiv definită*, dacă

$$\forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \quad \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$$

(Se arată că $\mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x}$ este real) ■

În particular, o matrice reală și simetrică este pozitiv definită, dacă: $\forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \quad \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$.

Matrici unitare:

Matricea \mathbf{U} se zice *unitară*, dacă

$$\mathbf{U}^* \mathbf{U} = \mathbf{I},$$

unde \mathbf{I} este matricea unitate. Echivalent, $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^*$ ■

O matrice *reală* este unitară dacă $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$, sau $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^T$.

Valorile proprii ale unei matrici unitare au modulul egal cu 1.

(Exercițiu: transpuneți și conjugați $\mathbf{U} \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}$; apoi, înmulțiți membru cu membru).

Exemplu de matrice unitară (reală):

Matricea de rotație a axelor în plan este unitară:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}$$

Într-adevăr, avem $\mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix}$, și se verifică imediat că $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$.

■

Proprietăți ale matricilor hermitiene (în particular, reale și simetrice):

P1. Dacă \mathbf{A} este hermitiană, și are valorile proprii $\{\lambda_i\}$ distincte sau nu, atunci:

(a) Există o matrice unitară \mathbf{U} , astfel că $\mathbf{U}^* \mathbf{A} \mathbf{U}$ este diagonală:

$$\mathbf{U}^* \mathbf{A} \mathbf{U} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n).$$

(se zice că \mathbf{U} diagonalizează pe \mathbf{A} .)

(b) Există n vectorii proprii liniar independenți care formează o bază ortonormată în \mathbf{C}^n (aceștia sunt coloanele lui \mathbf{U});

(c) Valorile proprii sunt *reale* ■

În particular, pentru \mathbf{A} reală și simetrică:

(a-1) Există \mathbf{U} unitară și reală, astfel că $\mathbf{U}^T \mathbf{A} \mathbf{U} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$.

(b-1) Există n vectorii proprii liniar independenți; aceștia formează o bază ortonormată în \mathbf{R}^n (coloanele lui \mathbf{U});

(c-1) Valorile proprii sunt *reale*, și vectorii proprii sunt reali ■

Avem și proprietatea:

P1'. Dacă \mathbf{A} este hermitiană (reală și simetrică) și pozitiv definită, atunci valorile proprii ale lui \mathbf{A} sunt *reale și pozitive* ■

1.3 Produs scalar și proprietăți de ortogonalitate

1.3.1 Spațiu vectorial real V_n

Fie x un vector din V_n , și \mathbf{x} matricea coloană a coordonatelor sale într-o bază a lui V_n

$$(x_i \in \mathbf{R}, i = \overline{1, n}).$$

Dacă matricea \mathbf{A} reală, este *simetrică și pozitiv definită*, se definește produsul scalar în raport cu matricea \mathbf{A} , prin:

$$\langle x, y \rangle_A = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$$

În particular, pentru $\mathbf{A} = \mathbf{I}$, acesta devine produsul scalar standard:

$$\langle x, y \rangle = \mathbf{x}^T \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{x}$$

Avem: $\langle y, x \rangle_A = \langle x, y \rangle_A$; $\langle y, x \rangle = \langle x, y \rangle$.

Vectorii x și y se zic *ortogonali* (relativ la produsul scalar), dacă $\langle x, y \rangle_A = 0$, sau

$$\langle x, y \rangle = 0 \quad \blacksquare$$

Astfel:

- Vectorii x și y sunt ortogonali relativ la matricea \mathbf{A} , dacă

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y} = 0, \text{ sau } \mathbf{y}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = 0.$$

- Vectorii sunt ortogonali, dacă $\mathbf{x}^T \mathbf{y} = 0$, sau $\mathbf{y}^T \mathbf{x} = 0$.

■

1.3.2 Spațiu vectorial complex V_n

Fie x un vector din V_n , și \mathbf{x} matricea coloană a coordonatelor într-o bază a lui V_n

$$(x_i \in \mathbf{C}, i = \overline{1, n}).$$

Dacă \mathbf{A} este o matrice *hermitiană și pozitiv definită*, se definește produsul scalar în raport cu matricea \mathbf{A} , prin:

$$\langle x, y \rangle_A = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \bar{\mathbf{y}} = \mathbf{y}^* \mathbf{A}^T \mathbf{x}.$$

(Ultima egalitate rezultă din aceea că scalarul $s = \langle x, y \rangle_A$ este egal cu transpusul său).

Produsul scalar definit de $\mathbf{A} = \mathbf{I}$ este:

$$\langle x, y \rangle = \mathbf{x}^T \bar{\mathbf{y}} = \mathbf{y}^* \mathbf{x}$$

Avem: $\langle y, x \rangle_A = \overline{\langle x, y \rangle_A}$, și $\langle y, x \rangle = \overline{\langle x, y \rangle}$.

Ortogonalitatea a doi vectori se definește ca înainte, prin condiția $\langle x, y \rangle_A = 0$, sau

$$\langle x, y \rangle = 0 \quad \blacksquare$$

Observație: Dacă avem $\langle x, y \rangle_A = 0$, avem și $\langle y, x \rangle_A = 0$ ■

Astfel:

- Vectorii \mathbf{x} , \mathbf{y} sunt ortogonali în raport cu \mathbf{A} , dacă:

$$\mathbf{x}^T \mathbf{A} \bar{\mathbf{y}} = 0, \text{ sau } \mathbf{y}^* \mathbf{A}^T \mathbf{x} = 0.$$

- Vectorii \mathbf{x} , \mathbf{y} sunt ortogonali, dacă:

$$\mathbf{x}^T \bar{\mathbf{y}} = 0, \text{ sau } \mathbf{y}^* \mathbf{x} = 0.$$

P2. Dacă \mathbf{A} este hermitiană, atunci:

- Vectorii proprii asociați la două valori proprii distincte sunt *ortogonali*:

$$\text{dacă } \lambda_1 \neq \lambda_2, \text{ atunci } \mathbf{x}_2^* \mathbf{x}_1 = 0 \text{ și } \mathbf{x}_1^* \mathbf{x}_2 = 0.$$

- Avem și: $\mathbf{x}_2^* \mathbf{A} \mathbf{x}_1 = 0$, $\mathbf{x}_1^* \mathbf{A} \mathbf{x}_2 = 0$.

(Dacă \mathbf{A} hermitiană este și pozitiv definită, vectorii \mathbf{x}_1 , \mathbf{x}_2 sunt *ortogonali relativ la matricea \mathbf{A}^T* .)

■

Dacă \mathbf{A} este reală și simetrică:

- Vectorii proprii asociați la două valori proprii *distincte* sunt *ortogonali*:

$$\mathbf{x}_2^T \mathbf{x}_1 = 0, \mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_2 = 0.$$

- Avem și: $\mathbf{x}_2^T \mathbf{A} \mathbf{x}_1 = 0$, $\mathbf{x}_1^T \mathbf{A} \mathbf{x}_2 = 0$.

(Dacă \mathbf{A} reală și simetrică, este și pozitiv definită, vectorii \mathbf{x}_1 , \mathbf{x}_2 sunt *ortogonali relativ la matricea \mathbf{A}* .)

■

1.4 Câțul Rayleigh

Fie \mathbf{A} o matrice $n \times n$ complexă (sau reală). Fie $\mathbf{v} \in \mathbf{C}^n$ un vector arbitrar, și definim

$$\rho(\mathbf{v}) = \frac{\mathbf{v}^* \mathbf{A} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^* \mathbf{v}}$$

$\rho(\mathbf{v})$ se numește *câțul Rayleigh*.

Proprietate-1:

┌ Dacă \mathbf{x} este vector propriu asociat cu λ , atunci $\rho(\mathbf{x}) = \lambda$ ■

Astfel, câțul Rayleigh poate fi utilizat pentru a găsi o aproximare a valorii proprii λ , dacă se cunoaște o aproximare \mathbf{v} a vectorului propriu \mathbf{x} : $\mathbf{v} \approx \mathbf{x} \Rightarrow \lambda \approx \rho(\mathbf{v})$.

Proprietate-2:

┌ Dacă matricea este hermitiană, câțul Rayleigh este mărginit de valorile proprii extreme ■

Valorile proprii sunt reale; fie acestea $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$, atunci, avem:

$$\lambda_n \leq \rho(\mathbf{v}) \leq \lambda_1, \text{ pentru orice } \mathbf{v} \in \mathbf{C}^n.$$

2 Metoda puterii

2.1 Metoda puterii

Metoda puterii determină valoarea proprie dominantă și vectorul propriu asociat, ale unei matrici \mathbf{A} , reale sau complexe.

Aplicată la inversa \mathbf{A}^{-1} metoda determină valoarea proprie cea mai mică (în modul), și vectorul propriu asociat cu aceasta. Aceasta, conform proprietății:

┌ Matricea \mathbf{A}^{-1} are ca valori proprii inversele valorilor proprii ale lui \mathbf{A} și aceiași vectori proprii.

Într-adevăr: din $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$, înmulțind la stânga cu \mathbf{A}^{-1} , rezultă $\mathbf{x} = \lambda\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}$, sau

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x} = \frac{1}{\lambda}\mathbf{x}.$$

Explicit, valorile proprii sunt:

$$\mathbf{A}: \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}; \quad \mathbf{A}^{-1}: \{\mu_1, \dots, \mu_n\}.$$

$$\text{Avem: } \mu_1 = \frac{1}{\lambda_n}, \dots, \mu_n = \frac{1}{\lambda_1}.$$

■

Ipotezele metodei puterii:

- Există un set de n vectori proprii *liniar independenți* $\{\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(n)}\}$;
- Există o *singură* valoare proprie dominantă λ_1 :

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|.$$

(Remarcați că prima inegalitate este strictă!)

Metoda:

Fie $\mathbf{w}^{(0)}$ un vector inițial, ales arbitrar – cu singura condiție ca să aibă o componentă în direcția lui $\mathbf{x}^{(1)}$. Pentru a împlini această cerință, unele coduri generează un vector aleator. (În fapt, $\mathbf{w}^{(0)}$ este o aproximație a vectorului propriu $\mathbf{x}^{(1)}$; dacă o astfel de aproximație este cunoscută, atunci aceasta accelerează iterația de mai jos).

Desvoltăm $\mathbf{w}^{(0)}$ în baza vectorilor proprii:

$$\mathbf{w}^{(0)} = a_1 \mathbf{x}^{(1)} + a_2 \mathbf{x}^{(2)} + \dots + a_n \mathbf{x}^{(n)} \quad (\text{a})$$

Presupunem că $a_1 \neq 0$ ([condiția](#) de mai sus), și formăm șirul de vectori

$$\mathbf{w}^{(k+1)} = \mathbf{A} \mathbf{w}^{(k)} = \mathbf{A}^{k+1} \mathbf{w}^{(0)}, \quad k \geq 0$$

Avem:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^{(1)} &= \mathbf{A} \mathbf{w}^{(0)} = \lambda_1 a_1 \mathbf{x}^{(1)} + \lambda_2 a_2 \mathbf{x}^{(2)} + \dots + \lambda_n a_n \mathbf{x}^{(n)} \\ &= \lambda_1 \left[a_1 \mathbf{x}^{(1)} + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right) a_2 \mathbf{x}^{(2)} + \dots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right) a_n \mathbf{x}^{(n)} \right] \end{aligned}$$

În general,

$$\mathbf{w}^{(k)} = \mathbf{A}^k \mathbf{w}^{(0)} = (\lambda_1)^k \left[a_1 \mathbf{x}^{(1)} + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k a_2 \mathbf{x}^{(2)} + \dots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k a_n \mathbf{x}^{(n)} \right] \quad (\text{b})$$

Cum $|\lambda_1| > |\lambda_i|$ pentru $i \geq 2$, urmează că rapoartele $(\lambda_i / \lambda_1)^k$ tind la 0 pentru $k \rightarrow \infty$. Astfel, pentru k crescător, vectorii $\mathbf{w}^{(k)}$ se aliniază din ce în ce mai mult la direcția vectorului propriu $\mathbf{x}^{(1)}$. În consecință, pentru un k suficient de mare, avem $\mathbf{w}^{(k)} \approx (\lambda_1)^k a_1 \mathbf{x}^{(1)}$.

Să considerăm de asemenea relația $\mathbf{w}^{(k+1)} \approx (\lambda_1)^{k+1} a_1 \mathbf{x}^{(1)}$. Luând orice coordonată non-zero a lui $\mathbf{w}^{(k+1)}$, $\mathbf{w}^{(k)}$, să zicem cea de-a m -a coordonată, obținem

$$\lambda_1 \approx \frac{w_m^{(k+1)}}{w_m^{(k)}}$$

Dezavantajul formulei precedente este că, coordonatele nenule ale lui $\mathbf{w}^{(k)}$ devin fie foarte mici ($|\lambda_1| < 1$), fie foarte mari ($|\lambda_1| > 1$), odată cu creșterea lui k . Aceasta se evită prin normalizarea (sau scalarea) lui $\mathbf{w}^{(k)}$, la fiecare pas k . Normele utilizate sunt norma- ∞ și norma-2.

Astfel, algoritmul metodei este:

$\mathbf{w}^{(0)}$ = Vector inițial (ales)

$$\mathbf{z}^{(k)} = \frac{\mathbf{w}^{(k)}}{\|\mathbf{w}^{(k)}\|}, \text{ pentru } k \geq 0 \dots \text{ Normalizare}$$

$\mathbf{w}^{(k+1)} = \mathbf{A}\mathbf{z}^{(k)}$, pentru $k \geq 0 \dots$ Iterație

Teste de oprire a iterației

1. *Test de coliniaritate a doi vectori succesivi.*

Vectorii $\mathbf{z}^{(k)}$ și $\mathbf{z}^{(k+1)}$ sunt coliniari, dacă rapoartele $\rho_i = z_i^{(k+1)} / z_i^{(k)}$, $z_i^{(k)} \neq 0$ sunt egale (coordoanatele nenule sunt proporționale), sau $z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} = 0$. În calculația practică, punem condiția $|\rho(i) - \rho(i_0)| \leq TOL$, dacă $|z_i^{(k)}| > TOL$; sau, să avem simultan, $|z_i^{(k)}| \leq TOL$ și $|z_i^{(k+1)}| \leq TOL$. TOL este o toleranță specificată; i_0 este indicele unei coordonate fixate: este convenabil să luăm $i_0 = imax =$ indicele coordonatei de modul maxim din $\mathbf{z}^{(k+1)}$.

Se introduc atunci, factorii de coliniaritate prin vectorul **colin**(1: n), definit astfel:

$$colin(i) = \begin{cases} z^{(k+1)}(imax) / z^{(k)}(imax) & \dots \text{dacă } |z^{(k+1)}(i)| \leq TOL \text{ și } |z^{(k)}(i)| \leq TOL \\ z^{(k+1)}(i) / z^{(k)}(i) & \dots \text{altfel} \end{cases}$$

$$i = \overline{1, n}$$

Testul este:

$$\|\mathbf{colin} - \mathbf{colin}(imax)\| \leq TOL$$

Aceasta înseamnă să avem $\frac{z_i^{(k+1)}}{z_i^{(k)}} - \frac{z_{imax}^{(k+1)}}{z_{imax}^{(k)}} \approx 0$ (pentru $z_k^{(k)} \neq 0$).

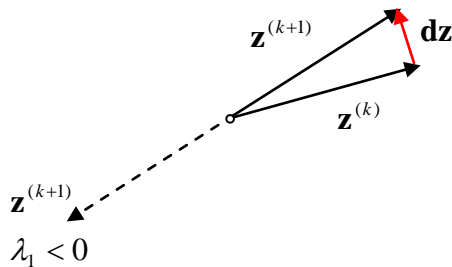
Observație

Test pentru norma-2 (euclidiană):

Dacă, pentru normalizarea lui $\mathbf{w}^{(k)}$, se utilizează norma-2, vectorii $\mathbf{z}^{(k)}$ au norma-2 egală cu 1, și testul de coliniaritate poate lua forma

$$\|\mathbf{z}^{(k+1)} - \mathbf{z}^{(k)}\|_2 \leq TOL.$$

O problemă specială apare pentru \mathbf{A} reală, dacă valoarea proprie dominantă este reală și negativă, $\lambda_1 < 0$, și anume: din $\mathbf{w}^{(k)} = \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{z}^{(0)} = (\lambda_1)^k [a_1 \mathbf{x}^{(1)} + \mathbf{r}^{(k)}]$ și $\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{w}^{(k)} / \|\mathbf{w}^{(k)}\|$, rezultă că vectorul $\mathbf{z}^{(k)}$ schimbă de semn de la pasul k la pasul $k+1$. (Valoarea proprie, dată de $\lambda_1^{(k+1)} = w_m^{(k+1)} / z_m^{(k)}$, nu este afectată.).



Testul de coliniaritate trebuie să țină cont de aceasta. Astfel, definim,

$$is = \text{sign}(1., \lambda_1^{(k+1)}), \quad \mathbf{dz} = \mathbf{z}^{(k+1)} - is * \mathbf{z}^{(k)}$$

Testul corect este

$$\|\mathbf{dz}\|_2 \leq TOL.$$

■

2. Test asupra lui λ :

Iterația se oprește prin condiția

$$|\lambda_1^{(k+1)} - \lambda_1^{(k)}| \leq TOL$$

unde TOL este o toleranță.

3. *Test de satisfacere a relației de definiție:*

$$\| \mathbf{Az} - \lambda \mathbf{z} \| \leq TOL$$

Practic, $\mathbf{z} = \mathbf{z}^{(k)}$, $\mathbf{Az}^{(k)} = \mathbf{w}^{(k+1)}$, și $\lambda = \lambda^{(k+1)}$. Definind

$$\mathbf{dif} = \mathbf{w}^{(k+1)} - \lambda^{(k+1)} \mathbf{z}^{(k)},$$

se pune testul

$$\| \mathbf{dif} \| \leq TOL$$

Observații:

- În cod, dacă valorile anterioare (k) sunt stocate în z_0 și λ_0 , iar valorile curente ($k+1$) în z și λ , definiția lui \mathbf{dif} devine

$$\mathbf{dif} = z - \lambda * z_0,$$

luând z înainte de normalizare.

- Vectorul $\mathbf{r} = \mathbf{Az} - \lambda \mathbf{z}$ se zice *vectorul rezidual*. Astfel, testul se mai scrie

$$\| \mathbf{r} \| \leq TOL.$$

Note

- Testul propriu pentru metodă este Testul 1, întrucât, în esență, metoda determină vectorul propriu nr. 1, și apoi determină λ_1 din acesta. Cu Testul 1, se obțin vectori proprii mai preciși decât cu Testul 2 (la aceeași toleranță).
- Testul 3 nu este specific metodei puterii, ci poate fi aplicat oricărei metode iterative pentru valori și vectori proprii. Codurile din Lapack (Bai et al.(2000)), utilizează Testul 3, cu $TOL = \varepsilon_M |\lambda|$, unde ε_M este ε -mașină.

(În metodele din ANA: Testul 3 va fi utilizat numai la verificarea sistemului propriu. Face excepție metoda puterii, unde pentru studiu, se poate alege unul din Testele 1-3; alegerea se face printr-un cod.)

■

Convergența:

Convergența $\lambda_1^{(k)} \rightarrow \lambda_1$ este liniară, iar rata convergenței este aproximativ $|\lambda_2 / \lambda_1|$.

(Acest rezultat are loc în ipoteza metodei $|\lambda_1| > |\lambda_2|$, cu ipoteza suplimentară: pentru $k \geq k_1$, cantitățile $(\lambda_i / \lambda_2)^k$, $i \geq 3$, sunt neglijabile în raport cu $(\lambda_2 / \lambda_1)^k$.)

2.2 Metoda puterii inverse cu translație (shift)

Fie matricea \mathbf{A} , cu valorile proprii λ_j , $j = 1, n$. Metoda găsește valoarea proprie λ_i a lui \mathbf{A} , cea mai apropiată de un număr dat s ; adică, $|\lambda_i - s| = \text{minim}$.

Se consideră matricea

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} - s\mathbf{I}$$

și presupunem că \mathbf{B} este nesingulară. Se verifică imediat că valorile proprii ale lui \mathbf{B} sunt $\mu_j = \lambda_j - s$. Cantitatea s zice *deplasare* sau *translație* (shift).

Fie $\mu_i = \lambda_i - s$, valoarea proprie de modul minim a lui \mathbf{B} , adică:

$$0 < |\mu_i| < \varepsilon < |\mu_j|, \text{ pentru } j \neq i.$$

Atunci, metoda puterii aplicată lui \mathbf{B}^{-1} produce valoarea proprie de modul maxim, fie aceasta $\nu_i = 1/\mu_i$ (ν_i este valoarea dominantă pentru \mathbf{B}^{-1}). Avem $\mu_i = 1/\nu_i$, și

$$\lambda_i = \frac{1}{\nu_i} + s.$$

Principala aplicație a metodei este de a găsi vectorul propriu, dacă este cunoscută o aproximație bună a valorii proprii, să zicem $\hat{\lambda}_i$. (Aceasta poate fi furnizată de o metodă în care se determină numai valorile proprii – nu și vectorii proprii.)

Se aplică metoda puterii inverse, cu deplasarea $s = \hat{\lambda}_i$. Chiar dacă $\hat{\lambda}_i$ este apropiată de λ_i , matricea $\mathbf{B} = \mathbf{A} - \hat{\lambda}_i\mathbf{I}$ este încă nesingulară, și se obține o bună aproximație a vectorului propriu $\mathbf{x}^{(i)}$.

Metoda iterației inverse cu deplasare, este una dintre cele mai precise metode pentru calculul vectorilor proprii.

Algoritmul practic, este următorul:

Iterația din metoda puterii, aplicată la matricea \mathbf{B}^{-1} , este

$$\mathbf{w}^{(k+1)} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{z}^{(k)}.$$

În loc de a inversa \mathbf{B} , calculăm $\mathbf{w}^{(k+1)}$ din sistemul liniar

$$\mathbf{B} \mathbf{w}^{(k+1)} = \mathbf{z}^{(k)},$$

prin descompunere \mathbf{LU} . Factorizarea se face o singură dată, și sistemul se rezolvă succesiv cu membrii dreپți $\mathbf{z}^{(k)}$, $k \geq 0$.

Nota – Numărul de operații

1) Lucrul cu matricea inversă \mathbf{B}^{-1} :

a. Inversare: $\sim \frac{4}{3} n^3$ (o singură dată)

b. Inmulțire matrice \times vector: n^2 .

2) Lucrul cu sistemul liniar:

a. Descompunere \mathbf{LU} : $\sim \frac{1}{3} n^3$ (o singură dată)

b. Rezolvare sistem liniar: n^2 .

Avantajul în (2) este mai degrabă evitarea erorilor de calcul a inversei (decât numărul mai scăzut de operații la pasul (a)).

■

2.3 Metoda iterațiilor simultane – matrice hermitiană.

Aceasta este o extindere a metodei puterii pentru o matrice \mathbf{A} hermitiană (în particular, reală și simetrică). O astfel de matrice, are valori proprii reale.

Presupunem, mai mult, că valorile proprii sunt de module distincte:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|.$$

Metoda

În loc de un vector de start $\mathbf{w}^{(0)}$, se utilizează o matrice de start, ale cărei coloane sunt vectorii de start: $\mathbf{W}^{(0)} = [\mathbf{w}^{(0,1)} \mid \mathbf{w}^{(0,2)} \mid \dots \mid \mathbf{w}^{(0,m)}]$.

Dacă matricea \mathbf{A} este $n \times n$, $\mathbf{W}^{(0)}$ este $n \times m$, unde $m \leq n$. Vectorii de start $\mathbf{w}^{(0,j)}$ trebuie să fie liniar independenți. Metoda de bază rămâne înmulțirea la stânga a lui $\mathbf{W}^{(0)}$ cu matricea \mathbf{A} , adică, $\mathbf{W}^{(k+1)} = \mathbf{A}\mathbf{W}^{(k)}$, $k \geq 0$. Înainte de fiecare etapă a iterației, matricea curentă \mathbf{W} este ortogonalizată prin procedeul Gram-Schmidt, astfel încât coloanele ei $\mathbf{w}^{(j)}$ devin vectori ortonormați (ortogonali, și având norma euclidiană unitară). Astfel, vectorii $\mathbf{w}^{(j)}$ formează o bază ortonormată a sub-spațiului m -dimensional al lui \mathbf{R}^n , sub-înțins de vectorii inițiali $\mathbf{w}^{(0,j)}$. În cursul iterației, această bază se aliniază din ce în ce mai mult la baza vectorilor proprii ai lui \mathbf{A} , *direcția* $\mathbf{w}^{(j)} \rightarrow$ *direcția* $\mathbf{x}^{(j)}$, $j \geq 1$. Valorile proprii se evaluează prin câțul Rayleigh. Iterația se încheie când se atinge o toleranță convenabilă, privitor la direcțiile a două baze succesive $\{\mathbf{w}^{(j)}\}$. Dacă matricea de start $\mathbf{W}^{(0)}$ are $m < n$ coloane, se obțin primii m vectori proprii. Pentru $m = n$, adică $\mathbf{W}^{(0)}$ este $n \times n$, se găsesc toți vectorii proprii.

Algoritmul

Se cere un număr $ne \leq n$ de vectori proprii. $\mathbf{W}^{(0)}$ și \mathbf{W} sunt matrici $n \times ne$.

1. Se definește matricea $\mathbf{W}^{(0)}$: dacă o aproximare inițială a vectorilor proprii nu este cunoscută, se ia $\mathbf{W}^{(0)} = [\mathbf{e}^{(1)} \mid \mathbf{e}^{(2)} \mid \dots \mid \mathbf{e}^{(ne)}]$, adică, $\mathbf{W}^{(0)}$ este formată din primele ne coloane ale matricii unitate \mathbf{I} . Pentru $ne = n$, $\mathbf{W}^{(0)} = \mathbf{I}$.
2. Se aplică ortogonalizarea Gram-Schmidt la $\mathbf{W}^{(0)}$ (cu excepția cazului în care aceasta este deja ortonormată). Se atribuie $\mathbf{W} = \mathbf{W}^{(0)}$.
3. Inițializare contor: iter = 0
4. Iterații: iter = iter + 1;

Atribuire: $\mathbf{W}^{(0)} = \mathbf{W}$ (\mathbf{W} = matricea curentă; $\mathbf{W}^{(0)}$ = matricea anterioară.)

5. Se calculează $\mathbf{W} = \mathbf{A}\mathbf{W}^{(0)}$.
6. Se calculează $\lambda_j, j = \overline{1, ne}$, prin câțul Rayleigh:

Fie $\mathbf{w}^{(j)}$ și $\mathbf{w}^{(0,j)}$ a j -a coloană a lui \mathbf{W} și $\mathbf{W}^{(0)}$, respectiv; avem

$$\lambda_j = \langle \mathbf{w}^{(0,j)}, \mathbf{w}^{(j)} \rangle$$

($\mathbf{w}^{(j)} = \mathbf{A}\mathbf{w}^{(0,j)}$ – Pasul 5; și $\langle \mathbf{w}^{(0,j)}, \mathbf{w}^{(0,j)} \rangle = 1$ – Pașii 2 și 4.)

7. Se aplică Gram-Schmidt la \mathbf{W} , astfel că \mathbf{W} devine ortonormată.
8. Se verifică atingerea toleranței TOL :

Prin testul de coliniaritate – 1.3, 1: se definește **colin**(n) pentru fiecare vector

$$\mathbf{z} = \mathbf{W}(:, je), \text{ și } test_val = \max_{je=1, ne} \|\mathbf{colin} - \mathbf{colin}(imax)\|.$$

(Întrucât \mathbf{z} sunt normalizați, testul se poate pune și sub forma din 1, [Observație](#).)

- Dacă $\|test_val\| \leq TOL$, ieșire din iterație.
- Altfel, GOTO 4.

Observații

- Se poate prescrie un număr limită de iterații $lnit$: atunci, se adaugă la Pasul 8 un test $iter \leq lmit$.
- Pasul 6 se poate realiza numai o singură dată, după ce s-a ieșit din iterație.

■

Observații

1. *Valori proprii de același modul*

Întrucât metoda iterațiilor simultane este în esență metoda puterii, nu se obține convergență pentru vectorii proprii, dacă există valori proprii de modul egal.

2. *Matrici non-hermitiene*

Dacă aplicăm algoritmul de mai sus unei matrici non-hermitiene, nu vom obține convergență pentru vectorii proprii, cu excepția vectorului propriu corespunzând valorii dominante λ_1 (pentru care, metoda revine la metoda puterii). Aceasta se întâmplă deoarece ipoteza esențială a metodei este că vectorii proprii formează o bază ortogonală – și procedeul Gram-Schmidt forțează ca, la fiecare pas k , vectorii $\mathbf{w}^{(k,j)}$ să fie ortogonali.

Totuși, dacă valorile proprii sunt de module distincte, atunci vectorii proprii sunt liniar independenți, și se obțin aproximații bune pentru valorile proprii. Explicația este că, procedeul Gram-Schmidt furnizează un set de vectori $\{\mathbf{w}^{(j)}\}$ liniar independenți (ortonormați), iar valorile proprii sunt calculate cu câțul Rayleigh – care dă aproximații bune ale valorilor proprii chiar cu aproximații grosiere pentru vectorii proprii.

Valorile proprii găsite pot fi utilizate ulterior, în metoda puterii inverse cu translație, pentru a obține vectorii proprii pentru valorile λ_i , $i \geq 2$.

■

3 Metoda Jacobi – matrice reală simetrică

Metoda:

Metoda Jacobi este o metodă convenabilă pentru a găsi toate valorile proprii și vectorii proprii ai unei matrici reale și simetrice, de ordin moderat. Determinarea vectorilor proprii este opțională.

Fie \mathbf{A} o matrice reală și simetrică. Dacă \mathbf{N} este o matrice nesingulară, atunci matricea $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{N}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{N}$ este similară cu \mathbf{A} , și are aceleași valori proprii (bara nu notează acum conjugata). Vectorii proprii \mathbf{x} ai lui \mathbf{A} , sunt legați de vectorii proprii $\bar{\mathbf{x}}$ ai lui $\bar{\mathbf{A}}$, prin: $\mathbf{x} = \mathbf{N}\bar{\mathbf{x}}$. ([Propoziția din 1.1](#)).

Să presupunem acum, că \mathbf{N} este *unitară*, adică $\mathbf{N}^{-1} = \mathbf{N}^T$. Matricea $\bar{\mathbf{A}}$ devine

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{N}^T \mathbf{A} \mathbf{N}$$

Notați că $\bar{\mathbf{A}}$ este de asemenea simetrică.

Diagonalizarea lui A:

Să presupunem că \mathbf{N} este aleasă astfel încât $\bar{\mathbf{A}}$ să devină *diagonală*:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{N}^T \mathbf{A} \mathbf{N} = \text{diag}(\bar{a}_{ii})$$

Pentru matricea $\bar{\mathbf{A}}$, avem proprietățile:

- Valorile proprii ale lui $\bar{\mathbf{A}}$ sunt elementele diagonale: $\lambda_i = \bar{a}_{ii}$
- Vectorii proprii ai lui $\bar{\mathbf{A}}$ sunt coloanele matricii unitate \mathbf{I} :
 $\bar{\mathbf{x}}^{(i)} = \mathbf{e}^{(i)}$ (unde $e_j^{(i)} = \delta_{ij}$).

În consecință, rezultă pentru \mathbf{A} :

- Valorile proprii ale lui \mathbf{A} se găsesc pe diagonala matricii $\bar{\mathbf{A}}$.
- Vectorii proprii ai lui \mathbf{A} sunt coloanele matricii \mathbf{N} .

Exemplu:

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{N} \mathbf{e}^{(1)} = \begin{bmatrix} n_{11} & \dots \\ n_{21} & \dots \\ \vdots & \\ n_{n1} & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n_{11} \\ n_{21} \\ \vdots \\ n_{n1} \end{bmatrix}$$

Diagonalizarea Jacobi:

Metoda Jacobi constă în transformări unitare (sau, ortogonale) aplicate succesiv lui \mathbf{A} , până la obținerea unei forme aproape diagonale. Anume, dacă \mathbf{N}_i sunt matrici unitare, matricea \mathbf{A} se transformă cum urmează:

$$\bar{\mathbf{A}}_1 = \mathbf{N}_1^T \mathbf{A} \mathbf{N}_1$$

$$\bar{\mathbf{A}}_2 = \mathbf{N}_2^T \bar{\mathbf{A}}_1 \mathbf{N}_2 = (\mathbf{N}_2^T \mathbf{N}_1^T) \mathbf{A} (\mathbf{N}_1 \mathbf{N}_2)$$

...

$$\bar{\mathbf{A}}_k = \mathbf{N}_k^T \bar{\mathbf{A}}_{k-1} \mathbf{N}_k = (\mathbf{N}_k^T \mathbf{N}_{k-1}^T \dots \mathbf{N}_1^T) \mathbf{A} (\mathbf{N}_1 \mathbf{N}_2 \dots \mathbf{N}_k)$$

Dacă matricea $\bar{\mathbf{A}}_k$ este *aproape* diagonală, adică, elementele non-diagonale sunt aproximativ zero, luăm

$$\bar{\mathbf{A}} \approx \bar{\mathbf{A}}_k = \mathbf{N}^T \mathbf{A} \mathbf{N}$$

unde

Observații

- Transformările \mathbf{N}_i se aplică succesiv, fiecare dintre ele eliminând elementul non-diagonal de mărime maximă.
- Elementele reduse la zero într-o transformare nu rămân zero la transformarea următoare. Dar, se poate arăta că fiecare transformare reduce suma de pătrate a elementelor non-diagonale cu $2a_{pq}^2$, adică, $\sum_{i \neq j} \bar{a}_{ij}^2 = \sum_{i \neq j} a_{ij}^2 - 2a_{pq}^2$. Astfel, după un anumit număr de transformări, această sumă poate fi făcută mai mică decât o toleranță ε aleasă dinainte.

Pentru alte detalii, v. Cap. 5-II, 2

■

Considerații de programare

Stocajul matricii:

Se lucrează cu triunghiul superior al lui \mathbf{A} , astfel încât, după diagonalizarea lui \mathbf{A} , elementul (1,1) conține λ_1 , etc. Triunghiul superior este stocat în vectorul

a ($n * (n+1) / 2$), în ordinea coloanelor, adică:

$$a = [a_{11} \mid a_{12} \quad a_{22} \mid a_{13} \quad a_{23} \quad a_{33} \mid \dots \mid a_{1n} \quad a_{2n} \quad \dots \quad a_{nn}]$$

Adresa elementului (i, j) este dată de următoarea funcție:

$$Loca(i, j) = (j-1) * j / 2 + i$$

În particular, elementul diagonal (i, i) are adresa $Loca(i, i) = (i+1) * i / 2$. După ce s-a efectuat o transformare, matricea curentă $\bar{\mathbf{A}}$ este stocată în același vector a .

■

Strategia de eliminare

Aceasta este *căutarea completă*, adică: se caută în toată matricea \mathbf{A} (concret, în vectorul a), elementul non-diagonal de modul maxim. (Pentru alte strategii, v. „Numerical Analysis”, Cap. 5-II, 2.)

Elementele non-diagonale se consideră zero, dacă sunt mai mici (în modul) decât o toleranță TOL .
