УДК 550.831+550.838

О процессах доортогонализации некоторых семейств векторов, возникающих при построении характеристических полиномов матриц и используемых при решении систем линейных алгебраических уравнений. 1

© *О. А. Черная, А. И. Якимчик, 2005*

Институт геофизики НАН Украины, Киев, Украина

Поступила 10 декабря 2004 г.

Представлено членом редколлегии В. И. Старостенко

У статті за літературними даними викладено деякі методи непрямого визначення коефіцієнтів характеристичного полінома матриці, що ґрунтуються на ортогоналізації деяких послідовностей векторів. Показано, що нормальний процес обчислень залежить не тільки від структури вихідної матриці, а й від вдалого вибору початкового вектора (або пари векторів, якщо йдеться про метод біортогоналізації).

In accordance with published data some methods of indirect determination of characteristic matrix polynome based upon orthogonalization of some vectors sequences have been outlined in the paper. The normal course of calculation process is shown to be dependent not only on the structure of the initial matrix but also on appropriate choice of the initial vector (or a couple of vectors if a method of bioorthogonalization is the case in point).

Введение. Основные задачи, в конечном счете определившие развитие классической линейной алгебры, связаны с определением собственных значений и соответствующих им собственных векторов некоторых матриц n-го порядка, а также с решением систем линейных уравнений. Напомним, что собственными значениями (или числами) λ_i, $i=1,2,\ldots,n$, матрицы $A=(a_{ij})$ n-го порядка называют [1, 6 — 8] корни ее характеристического полинома $p_n(\lambda)$ n-й степени, т. е. корни уравнения

$$p_n(\lambda)=\det(A-\lambda E^{(n)})=\left|A-\lambda E^{(n)}\right|=$$

$$=\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & \ldots\ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda & \ldots\ldots & a_{2n} \\ \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots\ldots & a_{nn}-\lambda \end{vmatrix}= \qquad (1)$$

$$=(-1)^n(\lambda^n-\alpha_1\lambda^{n-1}-\alpha_2\lambda^{n-2}-\ldots-\alpha_n)=0,$$

где $E^{(n)}=(\delta_{ij})$ — единичная матрица, действующая в n-мерном пространстве $\mathrm{R}^{(n)}$, δ_{ij} — символ Кронекера. Собственными векторами $\mathbf{u}^{(i)}$, $i=1,2,\ldots,n$, матрицы A называют нетривиальные векторы — решения системы n однородных линейных уравнений с n неизвестными, т. е. решения системы

$$\left(A-\lambda_i E^{(n)}\right)\mathbf{u}^{(i)}=0, \qquad (2)$$

где $\mathbf{u}^{(i)}=\left(u_{1i},u_{2i},\ldots,u_{ni}\right)^*$ — собственный вектор матрицы, принадлежащий собственному значению λ_i, $i=1,2,\ldots,n$, а звездочкой обозначена (и этого обозначения будем придерживаться впредь) операция транспонирования (сопряжения) вектора-столбца (или матрицы). Здесь же отметим, что не для каждой матрицы, заданной над полем вещественных чисел, найдутся n вещественных собственных значений λ_i и отвечающих им собственных векторов $\mathbf{u}^{(i)}$.

Центральной проблемой при определении собственных чисел является отыскание коэффициентов λ_i, $i=1,2,\ldots,n$, характеристического полинома. Это обусловлено тем, что непосредственное определение коэффициентов λ_i из соотношения (1) в виде сумм всех миноров i-го порядка определителя матрицы, опирающихся на главную диагональ, не только чрезвычайно громоздко, но и требует огромного числа операций, особенно при больших размерах матрицы. Последнее обстоятельство, в свою очередь, приводит к известным трудностям даже при использовании современных компьютеров. Поэтому для нахождения λ_i были созданы специальные вычислительные методы, в которых поиск коэффициентов λ_i реализуется без утомительных и бесперспективных вычислений многочисленных миноров определителя матрицы. Первым среди них был, по-видимому, метод У. Дж. Леверье (1840), который оставался еще довольно трудоемким. Более изящные и менее трудоемкие методы появились значительно позже, почти сто лет спустя. Это — методы А. Н. Крылова (1931), А. М. Данилевского (1937), К. Хессенберга (1941), Д. К. Фаддеева (1949), К. Ланцоша (1950—1952) и др.

Вычислительные аспекты этих и многих других методов глубоко проанализированы в основополагающих сочинениях К. Ланцоша [6], Д. К. Фаддеева и В. Н. Фаддеевой [8], Дж. Х. Уилкинсона [7] и В. В. Воеводина [3]. В этих работах после детального исследования влияния ошибок округления промежуточных вычислений на точность окончательных результатов сформулированы общие принципы составления устойчивых алгоритмов, реализующих на ЭВМ тот или иной метод. Одной из важных, если не самой важной особенностью таких алгоритмов является учет того, что арифметические операции над числами в компьютерах (из-за ограниченности диапазона используемых чисел и представления их конечным числом разрядов) не подчиняются обычным законам коммутативности, ассоциативности и дистрибутивности. В этом плане различные методы определения коэффициентов λ_i характеристического полинома (1) можно классифицировать по оценкам точности λ_i, гарантированных при реализации их на той или иной ЭВМ. На основании соображений, о которых речь пойдет ниже, можно надеяться, что наиболее точные оценки λ_i могут быть получены при реализации методов, основанных на ортогонализации вполне определенной последовательности векторов, тесно связанных с исследуемой матрицей. Поэтому среди всех методов косвенного определения коэффициентов λ_i предпочтение следует отдать методу минимальных итераций К. Ланцоша и ему родственным методам.

А теперь несколько слов в оправдание сделанного выбора. При реализации на компьютере метода минимальных итераций или любого другого метода, основанного на ортогонализации некоторой системы векторов, приходится вычислять рекуррентно друг с другом связанные зависимости, в которых в качестве коэффициентов используются значения скалярных произведений векторов. При таком способе счета неизбежно накопление ошибок округления, которые могут в значительной степени исказить окончательный результат. К счастью, использование свойств ортогонализации векторов позволяет исправить полученный результат. Отметим здесь же, что подобная ситуация, когда в процессе вычислений удается найти «жесткий репер» (в данном случае — ортогональность векторов), встречается не часто. По крайней мере, в методах У. Дж. Леверье, А. Н. Крылова, А. М. Данилевского, К. Хессенберга, Д. К. Фаддеева и других мы их не обнаруживаем. В этой связи следует ожидать, что оценки λ_i в методах, основанных на идее ортогонализации, будут лучшими по сравнению с таковыми в других методах.

Идею восстановления потерянной при вычислениях точности результата на случай ортогонализации векторов предложил К. Ланцош одновременно с описанием метода минимальных итераций [11, 12]. В соответствии с его предложением улучшение ортогональных свойств некоторой системы векторов, близких к ортогональным, должно производиться в результате повторной их ортогонализации. При этом поправки, улучшающие ортогональные свойства векторов, находятся из определенной системы линейных уравнений. Уточняющие в некоторых аспектах идею К. Ланцоша предложения были высказаны в работах [2, 3, 10]. В статьях [5, 9] идея К. Ланцоша развивается с других позиций, позволяющих избежать решения вспомогательной системы линейных уравнений. При этом в работе [9] для случая ортогонализации семейства векторов методом Грамма — Шмидта процесс ортогонализации подан в замкнутом виде. Развивая используемый в работе [9] подход на другие способы ортогонализации, сопутствующие различным каноническим представлениям вещественной матрицы n-го порядка, получим возможность решить *задачу*: *определить с высокой точностью коэффициенты характеристического полинома заданной вещественной матрицы n-го порядка.*

В свою очередь, решение поставленной задачи, как известно [4, 6 — 8], обеспечит надежное вычисление, во-первых, собственных чисел матрицы, во-вторых, ее собственных векторов и, наконец, в-третьих, (обобщенного, нормального) решения системы линейных уравнений с рассматриваемой матрицей. В самом деле, при построении аннулирующего матрицу полинома методом К. Ланцоша или ему родственными на промежуточных этапах конструкции мы получаем последовательность полиномов Штурма, что позволяет разделить корни полинома, а для их приближенного вычисления использовать либо итерационный метод И. Ньютона, либо более быстро сходящийся процесс приближений П. Л. Чебышева [1, 6]. Получив собственные числа и располагая последовательностью полиномов Штурма, по известным соотношениям [8] легко восстанавливаем собственные векторы матрицы. После этого не составляет труда решить систему линейных уравнений с этой матрицей при любой правой части системы [4, 8].

Прежде чем перейти к детальному рассмотрению сформулированной проблемы, отметим одну важную характеристику $c(A)$ матрицы A, играющую фундаментальную роль в вопросах устойчивости решений систем линейных уравнений, называемую мерой (или числом) обусловленности матрицы и определяемую соотношением

$$c(A)=\|A\|\|A^{-1}\|,$$

где $\|A\|$, $\|A^{-1}\|$ — некоторые нормы матрицы A и ее обратной A^{-1}, согласованные с нормой рассматриваемого векторного пространства. Если в этом пространстве возмущения Δ_b и Δ_A вектора $\mathbf{b}$ и матрицы A системы $Ax=b$ определяются соответственно величинами $\|\Delta_b\|$ и $\|\Delta_A\|$, а их относительные погрешности — числами

$$\delta\mathbf{b}=\frac{\|\Delta_b\|}{\|\mathbf{b}\|}, \qquad \delta A=\frac{\|\Delta_A\|}{\|A\|},$$

то, как известно [2], относительная погрешность решения системы оценивается неравенством

$$\delta x=\frac{\|\Delta_x\|}{\|x\|}\le\frac{c(A)}{1-c(A)\delta A}(\delta A+\delta\mathbf{b}). \tag{3}$$

Отсюда следует, что относительная погрешность решения возмущенной системы линейных уравнений зависит в значительной мере от числа $c(A)$ обусловленности матрицы A: с одной стороны, чем больше это число отличается, скажем, от единицы, тем ниже относительная точность решения системы. С другой стороны (и на это указывает знаменатель в правой части оценки (3)), чем больше мера обусловленности, тем с большей относительной точностью должна быть известна матрица данной системы для обеспечения существования ее решения. Таким образом, с точки зрения устойчивости весьма существенно, чтобы число обусловленности не было слишком большим. Однако из равенства

$$A^{-1}A=AA^{-1}=E^{(n)}$$

вытекает, что независимо от выбора нормы матрицы эти числа никогда не могут быть слишком малыми, по крайней мере любое из них (в зависимости от выбора нормы матрицы) не может быть меньше единицы. В работе [9] выделены классы преобразований исходной системы, не меняющие ее обусловленности. К их числу относятся ортогональные преобразования. В дальнейшем будет показано, что мера обусловленности матрицы играет существенную роль не только в вопросах устойчивости решений систем, но и в решении сформулированной проблемы. В свете последнего замечания и, главным образом, того, что класс ортогональных преобразований не изменяет меры обусловленности матрицы, следует еще раз подчеркнуть то исключительное положение, которое занимают методы, основанные на ортогонализации некоторой системы векторов, среди прочих методов косвенного определения коэффициентов характеристического полинома. В вычислительном аспекте эти методы оказываются наиболее устойчивыми.

1. Метод ортогонализации последовательных итераций [8]. Будем рассматривать вещественную матрицу A, действующую в n-мерном евклидовом пространстве $\mathrm{R}^{(n)}$, которая имеет n различных вещественных значений λ_i и соответствующих им n собственных векторов $\mathbf{u}^{(i)}$, $i=1,2,\ldots,n$. В соответствии с теоремой Кели — Гамильтона матрица A является корнем своего характеристического полинома $p_n(\lambda)$, т. е. удовлетворяет равенству

$$p_n(A)=A^n-\alpha_1A^{n-1}-\alpha_2A^{n-2}-\ldots-\alpha_nA=0. \tag{1.1}$$

Это замечательное равенство А. Н. Крылов использовал при определении коэффициентов λ_i полинома $p_n(\lambda)$ путем предварительного преобразования $p_n(\lambda)$ в эквивалентный ему полином $\varphi_n(\lambda)$. Преобразование, с помощью которого из $p_n(\lambda)$ получается $\varphi_n(\lambda)$, задается в базисе

$$\mathbf{u}, A\mathbf{u}, A^2\mathbf{u}, \ldots, A^{n-1}\mathbf{u}, \tag{1.2}$$

где $\mathbf{u} \in \mathrm{P}^{(n)}$ — такой вектор, что его итерация $A^k\mathbf{u}$ матрицей A принадлежит линейной оболочке $\mathcal{L}(\mathbf{u}, A\mathbf{u}, \ldots, A^{k-1}\mathbf{u})$ только при $k=n$. Другими словами, вектор $\mathbf{u}$ должен подбираться так, чтобы система векторов (1.2) была линейно независимой. Здесь и вплоть до конца первой части этой статьи будем считать, что выбор вектора $\mathbf{u}$ удовлетворяет поставленным условиям.

Плодотворная идея А. Н. Крылова о преобразовании $p_n(\lambda)$ в $\varphi_n(\lambda)$ с помощью базиса (1.2) по существу используется во всех методах косвенного определения λ_i, которые, таким образом, отличаются друг от друга только тем, как определяются компоненты вектора $A^k\mathbf{u}$ в этом базисе. В рассматриваемом ниже методе компоненты $A^k\mathbf{u}$ в базисе оболочки $\mathcal{L}(\mathbf{u}, A\mathbf{u}, \ldots, A^{k-1}\mathbf{u})$ определяются в процессе ортогонализации семейства $\{A^{k-1}\mathbf{u}\}$, $k=1,2,\ldots,n$.

В отличие от описания [8] изложим вычислительную схему метода для ортонормированной последовательности векторов $\mathbf{u}^{(i)}$, $i=1,2,\ldots,n$. В качестве исходного вектора ортонормированной системы примем

$$\mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|}, \quad \mathbf{u} = (u_{11}, u_{12}, \ldots, u_{1n})^*,$$

$$\|\mathbf{u}\| = \sqrt{(\mathbf{u}, \mathbf{u})} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} u_{1i}^2}.$$

Пусть первые k ортонормированных векторов $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k$ уже построены и $\mathcal{L}(\mathbf{u}_1, A\mathbf{u}_1, \ldots, A^{k-1}\mathbf{u}_1) = \mathcal{L}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k)$. Тогда вектор $\mathbf{u}_{k+1}$ будем строить так. Вычислим итерацию $A\mathbf{u}_k$ вектора $\mathbf{u}_k$ матрицей A и разложим $A\mathbf{u}_k$ на две составляющие:

$$\mathbf{u}'_{k+1} \perp \mathcal{L}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k), \ \mathbf{u}''_{k+1} \perp \mathcal{L}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k),$$

а для отыскания этих проекций составим линейную комбинацию

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}'_{k+1} + \mathbf{u}''_{k+1} = A\mathbf{u}_k - \sum_{i=1}^{k} \beta_{ki}\mathbf{u}_i. \tag{1.3}$$

Коэффициенты β_{ki} — компоненты проекции $\mathbf{u}'_{k+1}$ в базисе $\mathcal{L}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k)$ — найдем из условий ортогональности:

$$\beta_{ki} = (A\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_i), \quad i = 1, 2, \ldots, k,$$

$$\beta_{kk+1} = \|\mathbf{u}'_{k+1}\|, \quad k = 1, 2, \ldots, n-1. \tag{1.4}$$

В силу выбора начального вектора $\|\mathbf{u}'_{k+1}\| > 0$ для всех $k = 1, 2, \ldots, n-1$, что позволяет определить вектор $\mathbf{u}_{k+1}$ в виде

$$\mathbf{u}_{k+1} = \frac{\mathbf{u}'_{k+1}}{\|\mathbf{u}'_{k+1}\|}, \quad k = 1, 2, \ldots, n-1. \tag{1.5}$$

При этом по построению $\mathcal{L}(\mathbf{u}_1, A\mathbf{u}_1, \ldots, A^{k-1}\mathbf{u}_1) = \mathcal{L}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k)$ и, кроме того, вследствие равенства $\|\mathbf{u}'_{n+1}\| = 0$, вытекающего из (1.1), получаем

$$0 = A\mathbf{u}_n - \sum_{i=1}^{n} \beta_{ni}\mathbf{u}_i. \tag{1.6}$$

Для лучшей обозримости выпишем формулы (1.3) и (1.6) более подробно:

$$\begin{gathered}
\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_1, \\
\beta_{12}\mathbf{u}_2 = -\beta_{11}\mathbf{u}_1 + A\mathbf{u}_1, \\
\beta_{23}\mathbf{u}_3 = -\beta_{21}\mathbf{u}_1 - \beta_{22}\mathbf{u}_2 + A\mathbf{u}_2, \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\beta_{n-1,n}\mathbf{u}_n = -\beta_{n-1,1}\mathbf{u}_1 - \beta_{n-1,2}\mathbf{u}_2 - \ldots - \beta_{n-1,n-1}\mathbf{u}_{n-1} + A\mathbf{u}_{n-1}, \\
0 = -\beta_{n1}\mathbf{u}_1 - \beta_{n2}\mathbf{u}_2 - \ldots - \beta_{nn}\mathbf{u}_n + A\mathbf{u}_n.
\end{gathered} \tag{1.7}$$

Отсюда следует

$$\mathbf{u}_{k+1} = \frac{1}{\beta_{k,k+1}}\varphi_k(A)\mathbf{u}_1, \quad k = 0, 1, 2, \ldots, n, \tag{1.7A}$$

где полиномы $\varphi_k(t)$ вычисляются согласно соотношениям (1.7) по следующим рекуррентным формулам:

$$\begin{gathered}
\varphi_0(t) = 1, \\
\varphi_1(t) = (t - \beta_{11})\frac{1}{\beta_{12}}\varphi_0(t), \\
\varphi_2(t) = (t - \beta_{22})\frac{1}{\beta_{23}}\varphi_1(t) - \frac{\beta_{21}}{\beta_{23}}\varphi_0(t), \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\varphi_k(t) = (t - \beta_{kk})\frac{1}{\beta_{k,k+1}}\varphi_{k-1}(t) - \sum_{i=1}^{k-1}\frac{\beta_{ki}}{\beta_{k,k+1}}\varphi_{i-1}(t), \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
\varphi_n(t) = (t - \beta_{nn})\varphi_{n-1}(t) - \sum_{i=1}^{n-1}\beta_{ni}\varphi_{i-1}(t), \\
k = 1, 2, \ldots, n-1.
\end{gathered} \tag{1.8}$$

Таким образом, вычислив при удачном выборе начального вектора $\mathbf{u}_1$ все коэффициенты β_{ki}, $i=1,2,\ldots,k+1$; $k=1,2,\ldots,n$, по формулам (1,4), можно последовательно найти все полиномы $\varphi_0(t)$, $\varphi_1(t),\ldots,\varphi_n(t)$. В случае, если процесс вычисления β_{ki} закончится раньше времени, т.е. когда при $k<n$ окажется $\beta_{k,k+1}=0$, получим минимальный, аннулирующий вектор $\mathbf{u}_1$ полином $\varphi_k(t)$.

Легко показать, что $\varphi_n(t)$ с точностью до постоянного множителя совпадает с характеристическим полиномом $p_n(t)$ матрицы A. Заметим в заключение, что соотношения (1.7) можно записать в виде

$$AU=UB, \tag{1.9}$$

где $U=[\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\ldots,\mathbf{u}_n]$,

$$B=\begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots\cdots & 0 & 0 \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \cdots\cdots & 0 & 0 \\ \beta_{31} & \beta_{32} & \cdots\cdots & 0 & 0 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ \beta_{n-1,1} & \beta_{n-1,2} & \cdots\cdots & \beta_{n-1,n-1} & \beta_{n-1,n} \\ \beta_{n1} & \beta_{n2} & \cdots\cdots & \beta_{n,n-1} & \beta_{nn} \end{bmatrix}.$$

Отсюда следует, что матрицы A и B подобны, ибо $A=UBU^{-1}=UBU^{*}$, а это, в свою очередь, означает, что аннулирующие полиномы матриц A и B одинаковы.

2. Метод минимальных итераций К. Ланцоша [1, 8]. Метод минимальных итераций для решения проблемы собственных значений есть не что иное, как описанный в предыдущем параграфе метод ортогонализации последовательных итераций некоторого начального вектора симметрической матрицей.

Следовательно, если A: $\mathrm{P}^{(n)}\to\mathrm{P}^{(n)}$ — симметрическая вещественная матрица, действующая в n-мерном евклидовом пространстве $\mathrm{P}^{(n)}$, а $\mathbf{u}=(u_{11},u_{12},\ldots,u_{1n})^{*}\in\mathrm{P}^{(n)}$ — удачно выбранный вектор, то процесс ортонормализации последовательных итераций $\mathbf{u}_1, A\mathbf{u}_1,\ldots,A^k\mathbf{u}_1$, $k=1,2,\ldots,n$, вектора

$$\mathbf{u}_1=\frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|_{R^{(n)}}},\quad \|\mathbf{u}\|_{R^{(n)}}=\sqrt{(\mathbf{u},\mathbf{u})}$$

матрицей A осуществляется по трехчленным рекуррентным формулам:

$$\beta_{k,k+1}\mathbf{u}_{k+1}=-\beta_{k,k-1}\mathbf{u}_{k-1}-\beta_{k,k}\mathbf{u}_k+A\mathbf{u}_k,$$
$$k=2,3,\ldots,n-1, \tag{2.1}$$

а при $k=1$ и $k=n$ — соответственно по формулам

$$\beta_{12}\mathbf{u}_2=-\beta_{11}\mathbf{u}_1+A\mathbf{u}_1,$$
$$0=-\beta_{n,n-1}\mathbf{u}_{n-1}-\beta_{n,n}\mathbf{u}_n+A\mathbf{u}_n, \tag{2.2}$$

где

$$\beta_{ij}=(A\mathbf{u}_i,\mathbf{u}_j)\neq 0 \text{ для } |i-j|\le 1,$$
$$\beta_{ij}=(A\mathbf{u}_i,\mathbf{u}_j)=0 \text{ для } |i-j|>1. \tag{2.3}$$

В самом деле, из (1.7) имеем

$$\beta_{j,j+1}\mathbf{u}_{j+1}=-\beta_{j1}\mathbf{u}_1-\beta_{j2}\mathbf{u}_2-\ldots-\beta_{jj}\mathbf{u}_j+A\mathbf{u}_j,$$
$$\beta_{k,k+1}\mathbf{u}_{k+1}=-\beta_{k1}\mathbf{u}_1-\beta_{k2}\mathbf{u}_2-\ldots-\beta_{kk}\mathbf{u}_k+A\mathbf{u}_k. \tag{2.4}$$

Поскольку единичные векторы попарно ортогональны, а матрица симметричная, то из выражений (2.4) получим

$$\beta_{k,k+1}(\mathbf{u}_{k+1},\mathbf{u}_j)=-\beta_{kj}+(A\mathbf{u}_k,\mathbf{u}_j)=$$
$$=-\beta_{kj}+(\mathbf{u}_k,A\mathbf{u}_j)=-\beta_{kj}+$$
$$+(\mathbf{u}_k,\beta_{j1}\mathbf{u}_1+\beta_{j2}\mathbf{u}_2+\ldots+\beta_{jj}\mathbf{u}_j+\beta_{jj+1}\mathbf{u}_{j+1}). \tag{2.5}$$

А так как $\mathbf{u}_{k+1}\perp\mathcal{L}(\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\ldots,\mathbf{u}_j)$, $j=1,2,\ldots,k$, то из равенства (2.5) немедленно получаем

$$\beta_{kj}\equiv 0,\quad j=1,2,\ldots,k-2,$$
$$-\beta_{k,k-1}+\beta_{k-1k}=0,\quad j=k-1, \tag{2.6}$$
$$\beta_{k,k}=(A\mathbf{u}_k,\mathbf{u}_k),\quad j=k.$$

Далее из равенства

$$\beta_{k,k+1}=\left\|-\sum_{i=1}^{k}\beta_{ki}\mathbf{u}_i+A\mathbf{u}_k\right\|_{R^{(n)}}>0,\ k=1,2,\ldots,n-1,$$

с учетом выражений (2.6) находим

$$\beta_{k-1,k}=\beta_{k,k-1}=(A\mathbf{u}_k,\mathbf{u}_{r-1})>0. \tag{2.7}$$

Тем самым выражения (2.1) — (2.3) с учетом симметричности матрицы полностью доказаны, так как для любых $i,j=1,2,\ldots,n$, имеют место равенства

$$(A\mathbf{u}_i,\mathbf{u}_j)=(\mathbf{u}_i,A\mathbf{u}_j).$$

Итак, получены соотношения

$$\beta_{12}\mathbf{u}_2=-\beta_{11}\mathbf{u}_1+A\mathbf{u}_1,$$
$$\beta_{23}\mathbf{u}_3=-\beta_{21}\mathbf{u}_1-\beta_{22}\mathbf{u}_2+A\mathbf{u}_2,$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$\beta_{n-1,n}\mathbf{u}_n=-\beta_{n-1,n-2}\mathbf{u}_{n-2}-\beta_{n-1,n-1}\mathbf{u}_{n-1}+A\mathbf{u}_{n-1}, \tag{2.8}$$
$$0=-\beta_{n,n-1}\mathbf{u}_{n-1}-\beta_{n,n}\mathbf{u}_n+A\mathbf{u}_n,$$

которые по аналогии с равенством (1.9) можно записать более коротко:

$$AU = UB, \tag{2.9}$$

где $U = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n]$,

$$B = \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{32} & \beta_{33} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \beta_{n-1,n-2} & \beta_{n-1,n-1} & \beta_{n-1,n} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \beta_{n,n-1} & \beta_{n,n} \end{bmatrix}.$$

По построению очевидно $\mathcal{L}(\mathbf{u}_1, A\mathbf{u}_1, \ldots, A^{n-1}\mathbf{u}_1) = \mathcal{L}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n)$.

Таким образом, мы убедились в том, что если симметрическая матрица A имеет попарно различные собственные значения, то матрица B будет также симметрической, причем трехдиагональной с положительными элементами $\beta_{k,k-1}$ и $\beta_{k-1,k}$, $k = 2, 3, \ldots, n$, расположенными соответственно под и над главной диагональю $\beta_{k,k}$, $k = 1, 2, \ldots, n$. Далее, из подобия матриц A и B следует равенство

$$\sum_{i=1}^{n} a_{ii} = \sum_{i=1}^{n} b_{ii} = \alpha_1,$$

что можно использовать в качестве контроля при вычислениях.

Из выражений (2.8) со ссылкой на равенство $\mathcal{L}(\mathbf{u}_1, A\mathbf{u}_1, \ldots, A^{n-1}\mathbf{u}_1) = \mathcal{L}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n)$ заключаем, что ортонормированная последовательность векторов $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ получается в виде

$$\mathbf{u}_{k+1} = \frac{1}{\beta_{k,k+1}} \varphi_k(A)\mathbf{u}_1, \quad k = 0, 1, \ldots, n, \tag{2.8A}$$

где

$$\varphi_0(t) = 1,$$

$$\varphi_1(t) = \frac{1}{\beta_{12}} \left[(t - \beta_{11}) \varphi_0(t) \right],$$

$$\varphi_2(t) = \frac{1}{\beta_{23}} \left[(t - \beta_{22}) \varphi_1(t) - \beta_{21} \varphi_0(t) \right], \tag{2.10}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$\varphi_k(t) = \frac{1}{\beta_{k-1,k}} \left[(t - \beta_{k-1,k-1}) \varphi_{k-1}(t) - \beta_{k-1,k-2} \varphi_{k-2}(t) \right],$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$\varphi_n(t) = (t - \beta_{nn}) \varphi_{n-1}(t) - \beta_{n,n-1} \varphi_{n-2}(t),$$

$$k = 1, 2, \ldots, n-1.$$

причем при нормальном течении процесса вычислений, когда удастся вычислить все векторы линейной оболочки $\mathcal{L}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n)$, полином $\varphi_n(\lambda)$ совпадает с точностью до некоторой постоянной с характеристическим. Заметим, что семейство полиномов $\varphi_0(\lambda), \varphi_1(\lambda), \ldots, \varphi_n(\lambda)$, вычисляемое, как и любое другое семейство ортогональных (по некоторой мере) полиномов, по трехчленным рекуррентным соотношениям (2.10), образует в силу положительности коэффициентов $\beta_{k-1,k}$, $\beta_{k,k-1}$, $k = 2, 3, \ldots, n$, последовательность полиномов Штурма.

3. Метод A-минимальных итераций [8] заключается в построении совокупности A-ортогональных векторов на линейной оболочке $\mathcal{L}(q_1, Aq_1, \ldots, A^k q_1)$, $k = 1, 2, \ldots, n$, последовательных итераций некоторого начального вектора положительно определенной матрицей.

Из определения положительно определенной матрицы следует, что матрица A невырождена и, следовательно, для нее существует обратная A^{-1}, которая, очевидно, тоже положительно определена. С каждой положительно определенной матрицей, действующей в евклидовом пространстве $\mathrm{P}^{(n)}$, можно связать скалярное произведение (Ax, y) двух векторов $x, y \in \mathrm{P}^{(n)}$, которое в отличие от старого будем обозначать квадратными скобками, полагая

$$[x, y] = (Ax, y). \tag{3.1}$$

Легко убедиться, что скалярное произведение (3.1), которое часто будем называть A-скалярным произведением двух векторов $x, y \in \mathrm{P}^{(n)}$, удовлетворяет всем аксиомам обычного скалярного произведения, заданного в $\mathrm{P}^{(n)}$. Скалярное произведение $[x, y]$, так же как и (x, y), , индуцирует новую метрику на $\mathrm{P}^{(n)}$, превращая его в некоторое новое евклидово пространство, которое будем обозначать через $\mathrm{P}_A^{(n)}$. Норму элемента x в этом пространстве будем обозначать через $|x|$ и зададим ее следующим соотношением:

$$|x|^2 = \|x\|^2_{R_A^{(n)}} = [x, x] = (Ax, x), \quad x \in \mathrm{P}^{(n)}. \tag{3.2}$$

Будем называть ее A-нормой.

Сопряженными относительно матрицы A векторами (или A-ортогональными) назовем отличные от нулевого векторы $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathrm{P}^{(n)}$, удовлетворяющие равенству

$$(A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A\mathbf{y}) = 0. \tag{3.3}$$

A-ортонормированными будем называть векторы $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{y}_1$ из $\mathrm{P}^{(n)}$, для которых имеет место (3.3) при условии, что

$$\mathbf{x}_1=\frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|},\quad \mathbf{y}_1=\frac{\mathbf{y}}{|\mathbf{y}|},$$

где $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ — отличные от нулевого произвольные векторы $\mathrm{P}^{(n)}$.

После этих замечаний перейдем к рассмотрению вычислительной схемы метода A-минимальных итераций. Как и раньше будем предполагать, что исходный вектор $\mathbf{q}$ выбран удачно для его последовательных итераций. Пусть, начиная с A-единичного вектора

$$\mathbf{q}_1=\frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|},\quad \mathbf{q}=(q_{11},q_{12},\ldots,q_{1n})^*,$$

$$|\mathbf{q}|=\sqrt{(A\mathbf{q},\mathbf{q})},$$

построим по трехчленным рекуррентным соотношениям систему A-ортонормированных векторов следующим образом:

$$\begin{aligned}
b_{12}\mathbf{q}_2&=-b_{11}\mathbf{q}_1+A\mathbf{q}_1,\\
b_{23}\mathbf{q}_3&=-b_{21}\mathbf{q}_1-b_{22}\mathbf{q}_2+A\mathbf{q}_2,\\
b_{34}\mathbf{q}_4&=-b_{32}\mathbf{q}_2-b_{33}\mathbf{q}_3+A\mathbf{q}_3,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
b_{n-1,n}\mathbf{q}_n&=-b_{n-1,n-2}\mathbf{q}_{n-2}-b_{n-1,n-1}\mathbf{q}_{n-1}+A\mathbf{q}_{n-1},\\
0&=-b_{n,n-1}\mathbf{q}_{n-1}-b_{n,n}\mathbf{q}_n+A\mathbf{q}_n,
\end{aligned}\tag{3.4}$$

что, очевидно, можно переписать в виде матричного равенства

$$AQ=QB,\tag{3.5}$$

если ввести обозначения по аналогии с ранее встречающимися. А именно, положить

$$[\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\ldots,\mathbf{q}_n]=Q,\quad [A\mathbf{q}_1,A\mathbf{q}_2,\ldots,A\mathbf{q}_n]=AQ,$$

$$B=\begin{bmatrix}
\beta_{11} & \beta_{12} & 0 & \cdots\cdots & 0 & 0 & 0\\
\beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} & \cdots\cdots & 0 & 0 & 0\\
0 & \beta_{32} & \beta_{33} & \cdots\cdots & 0 & 0 & 0\\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\
0 & 0 & 0 & \cdots\cdots & \beta_{n-1,n-2} & \beta_{n-1,n-1} & \beta_{n-1n}\\
0 & 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 & \beta_{n,n-1} & \beta_{nn}
\end{bmatrix}.$$

Аннулирующий матрицу B полином $\varphi_n(\lambda)$ строится точно так же, как и соответствующий полином для симметрической матрицы (см. (2.10)), что вытекает из сопоставления схем (2.8) и (3.4). Поэтому имеем

$$\begin{aligned}
\varphi_0(t)&=1,\\
\varphi_1(t)&=\frac{1}{b_{12}}\left[(t-b_{11})\varphi_0(t)\right],\\
\varphi_2(t)&=\frac{1}{b_{23}}\left[(t-b_{22})\varphi_1(t)-b_{21}\varphi_0(t)\right],\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
\varphi_{k-1}(t)&=\frac{1}{b_{k-1,k}}\left[(t-b_{k-1,k-1})\varphi_{k-2}(t)-b_{k-1,k-2}\varphi_{n-3}(t)\right],\\
\varphi_n(t)&=\left[t-b_{n,n}\right]\varphi_{n-1}(t)-b_{n,n-1}\varphi_{n-2}(t).
\end{aligned}\tag{3.6}$$

Коэффициенты b_{ij} полиномов $\varphi_0(t), \varphi_1(t),\ldots,\varphi_n(t)$ в данном случае вычисляются по-другому. Впрочем их определение также сопутствует построению семейства A-ортонормированных векторов $\mathbf{q}_i$, $i=1,2,\ldots,n$, которые вычисляются индукцией по k. Предположим, что первые k векторов линейной оболочки $\mathcal{L}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\ldots,\mathbf{q}_k)$ уже построены так, что $\mathcal{L}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\ldots,\mathbf{q}_k)=\mathcal{L}(\mathbf{q}_1,A\mathbf{q}_1,\ldots,A^{k-1}\mathbf{q}_k)$. Тогда вектор $\mathbf{q}_{k+1}$ будем строить следующим образом. Составим линейную комбинацию

$$\mathbf{q}'_{k+1}=-b_{k,k-1}\mathbf{q}_{k-1}-b_{k,k}\mathbf{q}_k+A\mathbf{q}_k,\tag{3.7}$$

коэффициенты $b_{k,k-1}$, $b_{k,k}$ которой определим из условия A-ортогональности вектора $\mathbf{q}'_{k+1}$ с каждым из векторов оболочки $\mathcal{L}(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\ldots,\mathbf{q}_k)$. Для этого умножим $\mathbf{q}'_{k+1}$ на матрицу и запишем выражение, вытекающее из (3.7):

$$(\mathbf{q}_j,A\mathbf{q}'_{k+1})=0=$$

$$=-b_{k,k-1}(\mathbf{q}_j,A\mathbf{q}_{k-1})-b_{k,k}(\mathbf{q}_j,A\mathbf{q}_k)+(\mathbf{q}_j,A^2\mathbf{q}_k),$$

откуда

$$\begin{aligned}
b_{k,k-1}&=(A\mathbf{q}_k,A\mathbf{q}_{k-1}),\quad k=2,3,\ldots,n;\\
b_{k,k}&=(A\mathbf{q}_k,A\mathbf{q}_k),\quad k=1,2,\ldots,n.
\end{aligned}\tag{3.8}$$

Определив коэффициенты $b_{k,k-1}$, $b_{k,k}$, по формуле (3.7) вычисляем $\mathbf{q}'_{k+1}$, который при удачном выборе начального вектора $\mathbf{q}_1$ может оказаться отличным от нулевого. Если $\mathbf{q}'_{k+1}\neq 0$, то в качестве (k+1)-го вектора строящегося семейства берем

$$\mathbf{q}_{k+1}=\frac{\mathbf{q}'_{k+1}}{\left|\mathbf{q}'_{k+1}\right|},\quad b_{kk+1}=\left|\mathbf{q}'_{k+1}\right|, \tag{3.9}$$

$$k=1,2,\ldots,n-1.$$

В результате таких вычислений можно построить все векторы семейства $\{\mathbf{q}_k\}$, $k=1,2,\ldots,n$, определить элементы b_{ij} положительно определенной трехдиагональной матрицы B и получить представление (3.5).

4. Метод биортогонализации последовательных итераций начальных векторов матрицами A и A^* [6, 8]. Метод ортогонализации последовательных итераций, предложенный К. Ланцошем [11, 12], можно рассматривать как обобщение его метода минимальных итераций на случай несимметрической матрицы $A: \mathrm{P}^{(n)} \to \mathrm{P}^{(n)}$. Сущность метода состоит в том, что при удачном выборе начальных векторов $\mathbf{u}_1$ и $\mathbf{v}_1$ строится не одна, как в рассмотренных выше методах, а две последовательности $\{\mathbf{u}_i\}$ и $\{\mathbf{v}_i\}$ сопряженных между собой векторов $\mathbf{u}_i$ и $\mathbf{v}_i$, $i=1,2,\ldots,n$, каждая из которых находится в биортогональном отношении с одной из оболочек $\mathcal{L}\left(\mathbf{v}_1, A^*\mathbf{v}_1, \ldots, \left(A^*\right)^k \mathbf{v}_1\right)$ и $\mathcal{L}\left(\mathbf{u}_1, A\mathbf{u}_1, \ldots, A^k\mathbf{u}_1\right)$, $k=1,2,\ldots,n-1$. Рассмотрение двух вместо одной сопряженных последовательностей векторов обусловлено следующим известным из аналитической геометрии фактом. Все простые соотношения между координатами векторов (в виде скалярных произведений), заданных в прямоугольной системе координат, можно сохранить при переходе к косоугольной системе, если каждый вектор представлять в двойственном базисе двумя системами сопряженных друг другу координат (которые в прямоугольной системе между собой совпадают). Задавая векторы — последовательные итерации вектора — несимметрической матрицей в двойственном базисе $\{\mathbf{u}_i\}$ и $\{\mathbf{v}_i\}$, можно получить такую же простую по своей структуре матрицу B, как и в случае итераций симметрической матрицей.

Действительно, выстраивая две последовательности векторов по трехчленным формулам вида

$$\mathbf{u}_{k+1}=-\alpha_{k,k-1}\mathbf{u}_{k-1}-\alpha_{kk}\mathbf{u}_k+A\mathbf{u}_k,$$

$$\mathbf{v}_{k+1}=-\beta_{k,k-1}\mathbf{v}_{k-1}-\beta_{kk}\mathbf{v}_k+A^*\mathbf{v}_k, \tag{4.1}$$

$$k=2,3,\ldots,n,$$

$$\mathbf{u}_2=-\alpha_{11}\mathbf{u}_1+A\mathbf{u}_1,\quad \mathbf{v}_2=-\beta_{11}\mathbf{v}_1+A^*\mathbf{v}_1$$

и определяя коэффициенты α_{ij} и β_{ij} из условий биортогональности векторов $\mathbf{u}_i$ и $\mathbf{v}_i$, $i=1,2,\ldots,n$, сразу получаем

$$\alpha_{kk}=\frac{\left(A\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_k\right)}{\left(\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_k\right)}=\frac{\left(\mathbf{u}_k,A^*\mathbf{v}_k\right)}{\left(\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_k\right)}=\beta_{kk}. \tag{4.2}$$

Что же касается коэффициентов

$$\alpha_{k,k-1}=\frac{\left(A\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_{k-1}\right)}{\left(\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_{k-1}\right)}\ \text{ и }\ \beta_{k,k-1}=\frac{\left(A^*\mathbf{v}_k,\mathbf{u}_{k-1}\right)}{\left(\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_{k-1}\right)},$$

то они тоже равны между собой, что вытекает из следующей цепочки равенств:

$$\begin{aligned}
&\left(A\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_{k-1}\right)=\left(\mathbf{u}_k,A^*\mathbf{v}_{k-1}\right)=\\
&=\left(-\alpha_{k-1,k-2}\mathbf{u}_{k-2}-\alpha_{k-1,k-1}\mathbf{u}_{k-1}+A\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_k+\right.\\
&\left.+\beta_{k-1,k-2}\mathbf{v}_{k-2}+\beta_{k-1,k-1}\mathbf{v}_{k-1}\right)=\\
&=\alpha_{k-1,k-2}\,\beta_{k-1,k-2}\left(\mathbf{u}_{k-2},\mathbf{v}_{k-2}\right)-\\
&-\alpha_{k-1,k-1}\,\beta_{k-1,k-1}\left(\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_{k-1}\right)+\left(A\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_k\right)+\\
&+\beta_{k-1,k-2}\left(A\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_{k-2}\right)+\beta_{k-1,k-1}\left(A\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_{k-1}\right)=\\
&=\left(A\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_k\right)=\left(A^*\mathbf{v}_k,\mathbf{u}_{k-1}\right).
\end{aligned}$$

Далее, поскольку

$$\begin{aligned}
&\left(A^*\mathbf{v}_k,\mathbf{u}_{k-1}\right)=\left(A\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_{k-1}\right)=\left(\mathbf{u}_k,A^*\mathbf{v}_{k-1}\right)=\\
&=\left(\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_k+\beta_{k-1,k-2}\mathbf{v}_{k-2}+\beta_{k-1,k-1}\mathbf{v}_{k-1}\right)=\left(\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_k\right),
\end{aligned}$$

то, выбирая ориентировку векторов биортогонального базиса так, чтобы было $\left(\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_k\right)>0$ для любых значений $k=1,2,\ldots,n$, получаем окончательно

$$\beta_{k,k-1}\equiv\alpha_{k,k-1}=\frac{\left(\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_k\right)}{\left(\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_{k-1}\right)}>0, \tag{4.3}$$

$$k=2,3,\ldots,n.$$

Таким образом, для определения по формулам (4.2) и (4.3) координат $b_{k,k-1}$, b_{kk} векторов-итераций в биортогональном базисе $\{\mathbf{u}_i\}$, $\{\mathbf{v}_i\}$ требуется вычислить последовательно скалярные произведения $\left(\mathbf{u}_{k-1},\mathbf{v}_{k-1}\right)$, $\left(\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_k\right)$ и $\left(\mathbf{u}_k,A^*\mathbf{v}_k\right)=\left(A\mathbf{u}_k,\mathbf{v}_k\right)$ для $k=1,2,\ldots,n$ (при $k=1$ первое скалярное произведение не вычисляется). Сами же векторы $\mathbf{u}_{k+1}$ и $\mathbf{v}_{k+1}$, $k=1,2,\ldots,n$, затем находятся по рекуррентным соотношениям (4.1). Процесс вычислений обрывается, если при некотором значении $k=k_0$ получаем $(\mathbf{u}_{k_0}, \mathbf{v}_{k_0})=0$. Будем считать, что если $k_0=n+1$, то процесс вычислений протекал нормально. Если же $k_0<n+1$, то процесс вырождается. Возможны несколько случаев вырождения:

1) $\mathbf{u}_{k_0}=\mathbf{v}_{k_0}=0$ (двусторонний обрыв),

2) $\mathbf{u}_{k_0}=0, \mathbf{v}_{k_0}\neq 0$ (односторонний обрыв),

3) $\mathbf{u}_{k_0}\neq 0, \mathbf{v}_{k_0}=0$ (односторонний обрыв),

4) $\mathbf{u}_{k_0}\neq 0, \mathbf{v}_{k_0}\neq 0$, но $(\mathbf{u}_{k_0}, \mathbf{v}_{k_0})=0$ (тупиковый обрыв).

Односторонние и тупиковый обрывы процесса вычислений являются исключительными и их можно избежать посредством надлежащего выбора начальных векторов $\mathbf{u}_1$ и $\mathbf{v}_1$. Двусторонний обрыв аналогичен досрочному прекращению вычислений в других методах, причины которых обсуждаются ниже.

Исходя из выражений (4.1) — (4.3), можем записать

$$
\begin{aligned}
A\mathbf{u}_1 &= \beta_{11}\mathbf{u}_1+\mathbf{u}_2,\\
A\mathbf{u}_2 &= \beta_{21}\mathbf{u}_1+\beta_{22}\mathbf{u}_2+\mathbf{u}_3,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
A\mathbf{u}_{n-1} &= \beta_{n-1,n-2}\mathbf{u}_{n-2}+\beta_{n-1,n-1}\mathbf{u}_{n-1}+\mathbf{u}_n,\\
A\mathbf{u}_{n-1} &= \beta_{n-1,n-2}\mathbf{u}_{n-2}+\beta_{n-1,n-1}\mathbf{u}_{n-1}+\mathbf{u}_n,\\
A\mathbf{u}_n &= \beta_{n,n-1}\mathbf{u}_{n-1}+\beta_{nn}\mathbf{u}_n
\end{aligned}
\tag{4.4}
$$

для векторов из оболочки $\mathcal{L}(\mathbf{u}_1, A\mathbf{u}_1, \ldots, A^{n-1}\mathbf{u}_1)$ и

$$
\begin{aligned}
A^*\mathbf{v}_1 &= \beta_{11}\mathbf{v}_1+\mathbf{v}_2,\\
A^*\mathbf{v}_2 &= \beta_{21}\mathbf{v}_1+\beta_{22}\mathbf{v}_2+\mathbf{v}_3,\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
A^*\mathbf{v}_{n-1} &= \beta_{n-1,n-2}\mathbf{v}_{n-2}+\beta_{n-1,n-1}\mathbf{v}_{n-1}+\mathbf{v}_n,\\
A^*\mathbf{v}_n &= \beta_{n,n-1}\mathbf{v}_{n-1}+\beta_{nn}\mathbf{v}_n
\end{aligned}
\tag{4.5}
$$

для векторов из оболочки

$$\mathcal{L}\left(\mathbf{v}_1, A^*\mathbf{v}_1, \ldots, (A^*)^{n-1}\mathbf{v}_1\right).$$

Введем понятные уже нам обозначения:

$$[\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n]=U,\ [A\mathbf{u}_1, A\mathbf{u}_2, \ldots, A\mathbf{u}_n]=AU,$$

$$[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_n]=V,\ [A^*\mathbf{v}_1, A^*\mathbf{v}_2, \ldots, A^*\mathbf{v}_n]=A^*V,$$

$$
B^*=\begin{bmatrix}
\beta_{11} & 1 & 0 & \ldots\ldots & 0 & 0 & 0\\
\beta_{21} & \beta_{22} & 1 & \ldots\ldots & 0 & 0 & 0\\
0 & \beta_{32} & \beta_{33} & \ldots\ldots & 0 & 0 & 0\\
\ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots\\
0 & 0 & 0 & \ldots\ldots & \beta_{n-1,n-2} & \beta_{n-1,n-1} & 1\\
0 & 0 & 0 & \ldots\ldots & 0 & \beta_{n,n-1} & \beta_{nn}
\end{bmatrix},
$$

тогда соотношения (4.4) и (4.5) можно записать так:

$$AU=UB,\ A^*V=VB. \tag{4.6}$$

Аннулирующий матрицу B полином $\varphi_n(t)$ строится по трехчленным рекуррентным формулам в соответствии со схемами (4.4) и (4.5).

Список литературы

1. *Березин И. С., Жидков Н. П.* Методы вычислений. Т. 2. — М.: Физматгиз, 1960. — 620 с.
2. *Бурдина В. И.* К одному методу решения систем линейных алгебраических уравнений // Докл. АН СССР. — 1958. — **20**, № 2. — С. 235—238.
3. *Воеводин В. В.* Вычислительные основы линейной алгебры. — М.: Наука, 1977. — 304 с.
4. *Годунов С. К.* Решение систем линейных уравнений. — Новосибирск: Наука, 1980. — 177 с.
5. *Кублановская В. Н.* Об одном процессе доортогонализации системы векторов // Журн. вычисл. матемематики и матем. физики. — 1965. — **5**, № 2. — С. 326—329.
6. *Ланцош К.* Практические методы прикладного анализа. — М.: Физматгиз, 1961. — 524 с.
7. *Уилкинсон Дж. Х.* Алгебраическая проблема собственных значений. — М.: Наука, 1970. — 564 с.
8. *Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н.* Вычислительные методы линейной алгебры. — М. — Л.: Физматгиз, 1963. — 734 с.
9. *Черный А. В.* О точности численных решений некоторых задач геофизики // Теория и практика интерпретации гравитационных и магнитных полей в СССР. — Киев: Наук. думка, 1983. — С. 263—290.
10. *Hestenes M. R., Stiefel E.* Methods of conjugate gradients for solving linear systems // J. Res. Nat. Bur. Standards. — 1952 (1953). — **49**, № 5. — P. 409—436.
11. *Lanczos C.* An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators // Ibid. — 1950. — **45**, № 4. — P. 255—282.
12. *Lanczos C.* Solution of systems of equations by minimized iterations // Ibid. — 1952. — **49**, № 1. — P. 33—53.