

И 50

11-89-885

Им Ён Сек

УДК 512.643.5

**МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ СПЕКТРА,
А ТАКЖЕ СОБСТВЕННЫХ (КОРНЕВЫХ) ВЕКТОРОВ
ТРЕХ-, ПЯТИ- И СЕМИДИАГОНАЛЬНЫХ МАТРИЦ**

Специальность: 01.01.07 - вычислительная математика

**Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Дубна 1990

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:

кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник

Г.А. Емельяненко

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор

В.П. Ильин

кандидат физико-математических наук,
доцент

К.П. Ловецкий

Ведущее научно-исследовательское учреждение:

Научно-исследовательский вычислительный центр Московского государственного университета, г. Москва.

Автореферат разослан "____" _____ 1990г.

Защита диссертации состоится "____" _____ 1990г.

в _____ часов в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета

кандидат физико-математических наук

Иванченко

Э.М. Иванченко

Актуальность

Многие задачи теоретической и математической физики, вычислительной и прикладной математики, обработки экспериментальных данных, процессов и систем управления и т.д. сводятся к решению алгебраической проблемы собственных значений $(A - \lambda E) \dot{u}(\lambda) = 0$ в общем случае с произвольной квадратной матрицей A . Интерес же к задаче нахождения λ - собственных значений и соответствующих им $u(\lambda)$ - собственных, т.е. $(C - \lambda E) u(\lambda) = 0$ и $\ddot{u}(\lambda)$ - корневых, т.е. $(C - \lambda E) \ddot{u}(\lambda) = 0$, где $p = 1, 2, \dots, k$ и k - высота клетки Жордана, векторов трех-, пяти- и семидиагональных матриц C (I) общего вида

$$C_3 = \begin{bmatrix} q_1 & z_2 & & \\ p_2 & q_2 & z_3 & \\ & p_3 & q_3 & z_4 \\ & & p_4 & q_4 & z_5 \\ & & & p_5 & q_5 & z_6 \\ & & & & p_6 & q_6 & z_7 \\ & & & & & p_7 & q_7 & z_8 \end{bmatrix}, C_5 = \begin{bmatrix} q_1 & z_2 & a_3 & & \\ p_2 & q_2 & b_3 & & \\ & p_3 & q_3 & a_4 & \\ & & p_4 & q_4 & b_4 & \\ & & & p_5 & q_5 & a_5 & \\ & & & & p_6 & q_6 & b_6 & \\ & & & & & p_7 & q_7 & a_7 & \\ & & & & & & p_8 & q_8 & b_8 & \\ & & & & & & & p_9 & q_9 & a_9 & \\ & & & & & & & & p_{10} & q_{10} & b_{10} \end{bmatrix}, C_7 = \begin{bmatrix} q_1 & z_2 & a_3 & f_4 & & \\ p_2 & q_2 & b_3 & z_4 & & \\ & p_3 & q_3 & a_4 & f_5 & \\ & & p_4 & q_4 & b_4 & z_5 & \\ & & & p_5 & q_5 & a_5 & f_6 & \\ & & & & p_6 & q_6 & b_6 & z_6 & \\ & & & & & p_7 & q_7 & a_7 & f_7 & \\ & & & & & & p_8 & q_8 & b_8 & z_8 & \\ & & & & & & & p_9 & q_9 & a_9 & f_9 & \\ & & & & & & & & p_{10} & q_{10} & b_{10} & z_{10} \end{bmatrix} \quad (I)$$

произвольной структуры в значительной мере обусловлен [10] следующими обстоятельствами.

Во-первых, нахождение собственных значений и соответствующих им собственных (корневых) векторов матриц A общего вида является сложной задачей, решение которой на ЭВМ значительно упрощается в случае A - трехдиагональных матриц вида C_3 (I).

Во-вторых, замена алгебраической задачи $(A - \lambda E) \dot{u}(\lambda) = 0$ задачей $(C_3 - \lambda E) u(\lambda) = 0$ привлекательна, в связи с отмеченным выше преимуществом, еще и потому, что в литературе описан ряд методов, позволяющих выполнить устойчивое преобразование подобия при переходе от квадратной матрицы A к трехдиагональной матрице C_3 (I).

В-третьих, трех-, пяти- и семидиагональные матрицы играют и самостоятельную (выделенную) роль при решении многих задач вычислительной математики и математической физики.

В настоящее время имеется большое количество работ (монографий, сборников, обзоров, оригинальных публикаций), в которых либо рассмотрены методы решения указанных задач с матрицами C вида (I), либо приводятся различные примеры практических задач, к ним приводящих.

Известно [10], что наиболее эффективными (с точки зрения затрат времени и памяти ЭВМ, а также точности получаемых результатов) численными методами решения на ЭВМ алгебраической проблемы собственных значений $(C_3 = C_3^T)$ - вещественных симметричных трехдиагональных матриц C_3 (I)

являлись метод бисекций и методы обратных (прямых) итераций, а также $QL(QR)$ -методы. Если же $C_3 \neq C_3^T$, то в процессе итераций в $QL(QR)$ -алгоритмах нарушается [10] трехдиагональный вид исходной матрицы $C_3(I)$. Это приводит к дополнительным затратам памяти и времени счета на ЭВМ и следовательно к неэффективности (в указанном выше смысле) $QL(QR)$ -алгоритмов в случае большого порядка матриц $C_3 \neq C_3^T$. Методы бисекций и обратных итераций имеют, как известно [10], некоторое преимущество перед $QL(QR)$ -алгоритмами, если число определяемых собственных значений и векторов не более 25% от их общего числа. Если же матрица $C_3(I)$ имеет кратные или очень близкие собственные значения, то эффективность метода обратных итераций снижается, как известно [10], из-за необходимости учета большего числа параметров. Метод бисекций (деления отрезка пополам), основанный на анализе последовательностей Штурма, применим, как известно [10], для матриц $C_3 = C_3^T$ и $C_3(I)$ -матриц Якоби. Кроме того, если у матрицы $C_3(I)$ имеются очень близкие собственные значения, то общее число итераций для вычисления собственных значений такой матрицы на основе метода бисекций больше [10] чем у $QR(QL)$ -методов.

Другой хорошо известный метод вычисления спектра, т.е. всех λ -собственных значений матриц $C(I)$ общего вида основан на использовании LR -алгоритма. Полезная особенность этого метода заключается в том, что он сохраняет [10] ленточный вид исходных (в том числе $C_3(I)$ -трехдиагональной) матриц $C(I)$ и в процессе итераций, если на каждом шаге итерационного процесса существует разложение вида $\tilde{C} = \tilde{L} \tilde{R}$, где $k=1, 2, \dots$; \tilde{L} -нижняя треугольная и \tilde{R} -верхняя треугольная (двухдиагональные в случае $C_3(I)$) матрицы. Необходимым и достаточным условием существования [$\tilde{C} = \tilde{L} \tilde{R} \rightarrow \tilde{R} \tilde{L} = \tilde{C}^{(k)}, k=1, 2, \dots$]- такого итерационного процесса является (как известно [10]) отличие от нуля всех Δ_i^k -ведущих верхних угловых миноров как у исходных матриц $C(I)$ так и у порождаемых ими \tilde{C} -итерационных матриц. При этом на каждом шаге LR -алгоритма, т.е. при переходе от матриц \tilde{C} к $\tilde{C}^{(k)}$ в случае $C_3(I)$, требуется выполнить $(m-1)$ -делений и $2(m-1)$ -умножений, а также m -сложений и m -вычитаний. Известно также, что в QR -методе для $C_3 = C_3^T$ требуется выполнить помимо сложений и вычитаний еще $3m$ -умножений и $3m$ -делений. Отметим к тому же, что если у $C_3(I)$ отличны от нуля все $\{z_k \neq 0\}_{k=2}^m$ -внедиагональные элементы, то предварительно выполнив диагонально-подобное преобразование $D^{-1} C_3 D = \tilde{C}_3$, получим матрицу \tilde{C}_3 , у которой $\{z_k = 1\}_{k=2}^m$. И LR -алгоритм на каждом шаге будет требовать уже $(m-1)$ -делений и $(m-1)$ -умножений^{x)} помимо указанных выше сло-

x) Такое же количество делений, умножений и сложений (вычитаний) требуется в лучших из полученных нами методах, но при этом не требуется каких-либо ограничений на элементы матрицы $C_3(I)$.

жений и вычитаний. Однако, появление ($\Delta_i^k = 0$) -точных нулевых верхних ведущих угловых миноров у матриц $\tilde{C}^{(k)}$, $k=1, 2, \dots$ означает теоретическое нарушение (прерывание) LR -процесса. Практически же при вычислениях на ЭВМ появление ($\Delta_i^k \approx \epsilon$) -близких к нулю миноров, где ϵ -малая константа, обусловленная величиной разрядной сетки ЭВМ, приводит к потере значащих цифр и следовательно к снижению точности $\tilde{C} = \tilde{L} \tilde{R}$ -разложения. И это несмотря на то, что в случае трехдиагональных матриц $C_3(I)$ рекуррентные процессы (5), (12) для вычисления ($\Delta_i^k / \Delta_i^{k-1}$) -отношений этих миноров (функциями которых по сути являются элементы матриц \tilde{L} и \tilde{R}) как известно^{x)}, устойчивы.

Отмеченный выше недостаток LR -метода не носит характер принципиального теоретического ограничения, поскольку возможно преобразование $(\lambda + d)$ -сдвиг спектра, позволяющее избежать малых значений указанных миноров у матриц $(\tilde{C} + dE)$. Однако остается практически не решенным вопрос о способе оптимального выбора таких d -сдвигов. Поэтому на практике, как известно [10], при появлении у матриц $\tilde{C}^{(k)}$, $k=1, 2, \dots$ близких к нулю Δ_i^k -миноров используют вместо указанных d -сдвигов перестановки строк (столбцов) матриц \tilde{C} , что неизбежно приводит к нарушению вида исходных матриц $C(I)$ в процессе \tilde{C} -итераций. Такая замена одного "недостатка" LR -метода другим его "недостатком" явилась в значительной мере следствием стремления обеспечить необходимую точность разложений при расчетах и отказом от ограничений на объем используемой памяти ЭВМ.

В силу медленной сходимости LR -метода (как и QR -метода) при близких собственных значениях, на практике используются модифицированные (ускоренные) LR -методы, т.е.

$$(\tilde{C} - \tilde{W}E) = \tilde{L} \tilde{R} \rightarrow \tilde{R} \tilde{L} = \tilde{C}^{(k)}, \quad (2)$$

либо
$$(\tilde{C} - \tilde{W}E) = \tilde{L} \tilde{R} \rightarrow (\tilde{R} \tilde{L} + \tilde{W}E) = \tilde{C}^{(k)} \quad (3)$$

При этом оставался, как известно, также не решенным вопрос о способе оптимального выбора \tilde{W} -итерационных ускоряющих сдвигов.

В качестве \tilde{W} обычно выбирают [10] либо линейный, либо квадратичный сдвиги. Известно [10], что в LR -методе с линейным сдвигом среднее число итераций на одно собственное значение не меньше 5. Сходимость LR -метода со стандартным квадратичным сдвигом быстрее чем с линейным, но, как известно, вычисленные собственные значения могут оказаться комплексными даже для вещественных симметричных $C_3(I)$ -матриц.

Отметим наконец, что LR -метод не используется, как известно, для нахождения собственных векторов матриц $C_3(I)$, поскольку, во-первых,

x) См., например, §5 гл.2, В.Я.Скоробогатко. Теория ветвящихся цепных дробей и ее применение в вычислительной математике, М., Наука, 1983.

пришлось бы хранить информацию о всех итерационных матрицах L_k , и, во-вторых, существует опасность накопления погрешности при перемножении всех матриц L_k , т.е. при получении $L = (L_1 \cdot L_2 \cdot \dots \cdot L_n)$, где $G = L \cdot C \cdot L^{-1}$ и G – блочно-треугольная (в общем случае) матрица.

Итак, приведенный выше краткий анализ достоинств и недостатков, а также нерешенных проблем, присущих (в том числе и наиболее известным из существующих в настоящее время) методам решения алгебраической задачи собственных значений для матриц вида $C(I)$, обусловили актуальность работ [1+10], положенных в основу настоящей диссертации и выполненных в соответствии с проблемно-тематическим планом научно-исследовательских работ ЛВТА ОИЯИ.

Цель работы

Реферлируемая диссертационная работа посвящена разработке и систематизации эффективных методов нахождения собственных значений и соответствующих им собственных (корневых) векторов для трех-, пяти- и семидиагональных матриц общего вида произвольной структуры, а также созданию на их основе стандартных программ на ФОРТРАНе для ЭВМ ЕС-1061(60).

Научная новизна

1. Получено (на основе модификаций $LR(RL)$ -алгоритмов, а также применения обобщенной мультипликативной теории^х) ведущих угловых миноров) множество эффективных методов вычисления всех собственных значений трех-, пяти- и семидиагональных матриц общего вида произвольной структуры и собственных (корневых) векторов указанных выше трехдиагональных матриц. При этом лучшими из полученных нами методов для нахождения собственных значений трехдиагональных матриц являются $T_d W_d$ - и $T_d W_d$ -методы [3], требующие $(m-1)$ -деление и $(m-1)$ -умножение в каждой итерации, а также не накладывающие каких-либо ограничений на элементы исходной матрицы.

2. Предложены эффективные универсальные способы выбора ускоряющих сдвигов при поиске всех собственных значений трех-, пяти- и семидиагональных матриц.

Практическая значимость работы

Создана (на основе разработанных алгоритмов) и отлажена система стандартных программ на ФОРТРАНе для ЭВМ ЕС-1061(60), лучшие из которых по основным параметрам превосходят известные и широко распространенные в настоящее время стандартные программы подобного типа.

х) Г.А.Емельяненко, Т.Т.Рахмонов, Препринт ОИЯИ, РИИ-89-340, Дубна, 1989.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на семинаре по методам вычислительной и прикладной математики ЛВТА ОИЯИ, на семинаре по структуре атомного ядра ЛТФ ОИЯИ, на II Всесоюзной конференции "Вычислительная физика и математическое моделирование" (г. Волгоград, 11-14 сентября 1989г.), на семинаре кафедры вычислительной математики Пхеньянского университета (г. Пхеньян, КНДР)

Публикации.

По теме диссертации опубликовано 10 работ [1+10], выполненных автором совместно с научным руководителем Г.А.Емельяненко и результаты которых (за исключением методов (и программ) поиска собственных значений блочно-трехдиагональных матриц общего вида и матриц Хессенберга [8, 9]) вошли в диссертацию.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, 5-глав и основных результатов. В последней главе приведены описание системы программ на ФОРТРАНе ЭВМ и результаты расчетов. Объем диссертации – 150 стр. машинописного текста (в том числе II таблиц). Список литературы включает 150 наименований.

В диссертации принята трехзначная нумерация (а,б,в) формул, лемм, теорем, замечаний, следствий и представлений, где а – номер главы, б – номер параграфа, в – номер соответствующих формул, лемм, теорем, замечаний, следствий и представлений в этом параграфе.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обсуждается содержание предмета исследований, обосновывается их актуальность и приводится анализ литературы. Сформулированы также цель, научная новизна и практическая значимость работы. Указаны основные результаты, выносимые на защиту.

В первой главе, состоящей из трех параграфов, разработаны [1,2] (на основе модификации $LR(RL)$ -методов с использованием мультипликативной теории ведущих угловых миноров, а также свойств матрично-факториз-

зованных представлений^{х)} этих (и им обратных) матриц) методы вычисления полного спектра вещественных трехдиагональных матриц общего вида C_3 (I) со всеми различными

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_m| \quad (4)$$

вещественными собственными значениями, у которых (и их итерационных матриц) все ведущие угловые миноры отличны от нуля. В § I.1 построено [1,2] на основе LR-метода множество (теоремы I.1.1, I.1.2) из пяти алгоритмов для вычисления полного спектра C_3 -трехдиагональных матриц общего вида (I), у которых (и их итерационных матриц) все верхние ведущие угловые миноры отличны от нуля. Четыре из указанных методов основаны (соответственно каждый) на одной из следующих итерационных последовательностей

$$\left. \begin{aligned} \overset{\infty}{L}_{i+1} &= 1 - \overset{\infty}{T}_i \overset{\infty}{L}_i^{-1}; \overset{\infty}{L}_i = \overset{\infty}{L}_i = 1; i = 2, 3, \dots, m \\ \overset{\infty}{T}_i &= \overset{\infty}{T}_i / (1 - \overset{\infty}{T}_{i-1}); \overset{\infty}{T}_1 = 0; i = 2, 3, \dots, m \\ \overset{\infty}{T}_i &= (\overset{\infty}{P}_i \zeta_i) / (\overset{\infty}{Q}_{i-1} - \overset{\infty}{T}_{i-1}); \overset{\infty}{T}_1 = 0; i = 2, 3, \dots, m \\ \overset{\infty}{L}_i &= \overset{\infty}{Q}_i - \overset{\infty}{P}_i \zeta_i / \overset{\infty}{L}_{i-1}; \overset{\infty}{L}_1 = \overset{\infty}{Q}_1; i = 2, 3, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

давших формально название методу. Здесь и всюду далее

$$\overset{\infty}{Y}_i = \overset{\infty}{P}_i \zeta_i / (\overset{\infty}{Q}_i - \overset{\infty}{Q}_i); \overset{\infty}{Y}_1 = 0; i = 2, 3, \dots, m, \quad (6)$$

а также $\{\overset{\infty}{Q}_i = Q_i + d\}_{i=1}^m$, $\{\overset{\infty}{P}_i, \overset{\infty}{Q}_i, \overset{\infty}{L}_i, \overset{\infty}{P}_i = P_i\}_{i=2}^m$ - элементы исходной матрицы C_3 (I) и d - некоторое вещественное число такое, что $\{\overset{\infty}{Q}_i \neq 0\}_{i=1}^m$. Пятый метод основан на использовании комбинации последовательностей $\{\overset{\infty}{T}_i\}$ и $\{\overset{\infty}{L}_i\}$. При этом лучшим из построенных [1,2] в § I.1 пяти методов является следующий

T_{LD}-метод

$$\left. \begin{aligned} \overset{\infty}{Q}_i &= (\overset{\infty}{Q}_i - \overset{\infty}{T}_i) + \overset{\infty}{T}_{i+1}; \overset{\infty}{T}_{m+1} = 0; i = 1, 2, \dots, m \\ \overset{\infty}{T}_i &= [(\overset{\infty}{Q}_i - \overset{\infty}{T}_i) \cdot \overset{\infty}{T}_{i-1}] / (\overset{\infty}{Q}_{i-1} - \overset{\infty}{T}_{i-1}); \overset{\infty}{T}_1 = 0; i = 2, 3, \dots, m \\ \lambda_i &= \lim_{k \rightarrow \infty} \overset{\infty}{Q}_i - d; i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

где $\overset{\infty}{T}_i = (\overset{\infty}{P}_i \zeta_i) / (\overset{\infty}{Q}_{i-1} - \overset{\infty}{T}_{i-1}); \overset{\infty}{T}_1 = 0; i = 2, 3, \dots, m; K = 1, 2, \dots, \quad (8)$

который требует, как видно, $(m-1)$ -делений, $(m-1)$ -умножений, m -сложений и m -вычитаний на каждой итерации, а также не накладывает никаких условий на элементы исходной матрицы. В T_{LD} -методе собственные значения определяются с абсолютной погрешностью не хуже чем $\{|\Delta \lambda_i| < m \cdot \varepsilon\}_{i=1}^m$, а в остальных методах - $\{|\Delta \lambda_i| < M \cdot \varepsilon\}_{i=1}^m$, где m -порядок исходной матрицы, $M = m^2 \times (\zeta_i) / m \lambda_i n(\lambda_i)$ и ε -константа, опре-

деляемая разрядной сеткой ЭВМ. В следствии I.1.1 отмечено, что скорость сходимости алгоритмов, полученных в теореме I.1.2, определяется с учетом равенств

$$\overset{\infty}{T}_i = \left[\prod_{n=1}^K \left(\frac{\overset{(n)}{L}_i(d)}{\overset{(n)}{L}_{i-1}(d)} \right) \right] \cdot \overset{(0)}{T}_i; \left(\overset{\infty}{P}_i = \left[\prod_{n=1}^K \left(\frac{\overset{(n)}{L}_i(d)}{\overset{(n)}{L}_{i-1}(d)} \right) \right] \cdot \overset{(0)}{P}_i \right); i = 2, 3, \dots, m. \quad (9)$$

Из леммы I.1.6 следует, что для любого i из интервала $2 \leq i \leq m$ соотношения

$$\left. \begin{aligned} \overset{\infty}{L}_i = 0 &\rightarrow \left[\overset{\infty}{L}_{i-1} = \overset{\infty}{Y}_i; \overset{\infty}{L}_{i+2} = 1, \overset{\infty}{L}_{i+1} = \infty; \overset{\infty}{L}_i \cdot \overset{\infty}{L}_{i+1} = -\overset{\infty}{Y}_i \right] \\ \overset{\infty}{T}_{i-1} = 1 &\rightarrow \left[\overset{\infty}{T}_i = \infty, \overset{\infty}{T}_{i+2} = \overset{\infty}{Y}_{i+2}, \overset{\infty}{T}_{i+1} = 0; \overset{\infty}{T}_i \cdot \overset{\infty}{T}_{i+1} = -\overset{\infty}{Y}_{i+1} \right] \\ \overset{\infty}{T}_{i-1} = \overset{\infty}{Q}_{i-1} &\rightarrow \left[\overset{\infty}{T}_i = \infty, \overset{\infty}{T}_{i+1} = 0, \overset{\infty}{T}_{i+2} = \overset{\infty}{P}_{i+2} \zeta_{i+2} \overset{\infty}{Q}_{i-1}^{-1}; \overset{\infty}{T}_{i+1} \overset{\infty}{L}_i = -\overset{\infty}{P}_{i+1} \zeta_{i+1} \right] \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

являются достаточными, а

$$\overset{\infty}{L}_{i-1} = 0 \rightarrow \left[\overset{\infty}{L}_i = \infty, \overset{\infty}{L}_{i-2} = \overset{\infty}{P}_{i-2} \zeta_{i-2} \overset{\infty}{Q}_{i-1}^{-1}, \overset{\infty}{L}_{i+1} = \overset{\infty}{Q}_{i+1}; \overset{\infty}{L}_i \cdot \overset{\infty}{L}_{i+1} = -\overset{\infty}{P}_i \zeta_i \right] \quad (11)$$

необходимыми и достаточными условиями обращения в нуль $(i-1)$ -верхнего ведущего углового минора итерационной матрицы $\overset{\infty}{C}$. Эти соотношения можно охарактеризовать как доопределения и они играют важную роль в обеспечении корректности вычислений. В § I.2 построено [2] (на основе RL-метода) множество (теорема I.2.1) также из пяти методов для вычисления полного спектра трехдиагональных матриц. Этот результат получен также при условии, что все $\overset{\infty}{L}_i^j$ -нижние ведущие угловые миноры матриц $\overset{\infty}{C}_k$ (и их итерационных матриц $\overset{\infty}{C}, k = 2, 3, \dots$) отличны от нуля. В этих методах соответственно использованы следующие последовательности

$$\left. \begin{aligned} \overset{\infty}{G}_{i-1} &= 1 - \overset{\infty}{Y}_{i-1} \overset{\infty}{G}_i^{-1}; \overset{\infty}{G}_m = \overset{\infty}{G}_{m-1} = 1; j = m-1, \dots, 1 \\ \overset{\infty}{S}_{i-1} &= \overset{\infty}{Y}_i / (1 - \overset{\infty}{S}_i); \overset{\infty}{S}_m = 0; j = m, m-1, \dots, 2 \\ \overset{\infty}{F}_{i-1} &= (\overset{\infty}{P}_i \zeta_i) / (\overset{\infty}{Q}_i - \overset{\infty}{F}_i); \overset{\infty}{F}_m = 0; j = m, m-1, \dots, 2 \\ \overset{\infty}{L}_{i-1} &= \overset{\infty}{Q}_{i-1} - \overset{\infty}{P}_i \zeta_i / \overset{\infty}{L}_i; \overset{\infty}{L}_m = \overset{\infty}{Q}_m; j = m, m-1, \dots, 2 \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

При этом лучшим из построенных [2] в § I.2 методов является

T_{GD}-метод

$$\left. \begin{aligned} \overset{\infty}{Q}_i &= (\overset{\infty}{Q}_i - \overset{\infty}{F}_i) + \overset{\infty}{F}_{i+1}; \overset{\infty}{F}_m = 0; j = m, m-1, \dots, 1 \\ \overset{\infty}{F}_{i-1} &= [(\overset{\infty}{Q}_{i-1} - \overset{\infty}{F}_{i-1}) \cdot \overset{\infty}{F}_i] / (\overset{\infty}{Q}_i - \overset{\infty}{F}_i); \overset{\infty}{F}_m = 0; j = m, m-1, \dots, 2 \\ \lambda_i &= \lim_{k \rightarrow \infty} \overset{\infty}{Q}_i - d; j = m, m-1, \dots, 1 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

где $\overset{\infty}{F}_{i-1} = (\overset{\infty}{P}_i \zeta_i) / (\overset{\infty}{Q}_i - \overset{\infty}{F}_i); \overset{\infty}{F}_m = 0; j = m, m-1, \dots, 2, \quad (14)$

в котором также требуются $(m-1)$ -делений, $(m-1)$ -умножений, m -сложений и m -вычитаний на каждой итерации, а также не накладывает никаких

х) Г.А.Емельяненко, Т.Т.Рахмонов. Препринт ОИАИ, РИ-87-533, Дубна, 1987; РИ-88-599, Дубна, 1988.

ограничений на элементы исходной матрицы $C_3(I)$. Собственные значения в $T_d d$ -алгоритме определяются с абсолютной погрешностью не хуже чем $\{|\Delta\lambda_i| < m \cdot \varepsilon\}_{i=1}^m$, а в остальных методах § 1.2 - не хуже чем $\{|\Delta\lambda_i| < m \cdot \varepsilon\}_{i=1}^m$. В лемме 1.2.1 отмечены достаточные и необходимые и достаточные условия обращения в нуль нижних ведущих угловых миноров итерационной матрицы \tilde{C} . Эти условия можно также охарактеризовать как доопределения и они играют важную роль в обеспечении корректности вычислений. В § 1.3 доказаны [2] лемма 1.3.1 и теорема 1.3.1. В лемме 1.3.1 показано, что равенства

$$\tilde{L}_1 = 0; \quad \tilde{L}_i + \tilde{L}_{i+1} = \tilde{q}_i; \quad 2 \leq i \leq m-1; \quad \tilde{L}_m = 0, \quad (15)$$

где $\{\tilde{L}_i\}$ и $\{\tilde{L}_i\}$ есть (5)₄ и (12)₄, являются необходимыми и достаточными условиями вырожденности матриц \tilde{C} , у которых все ведущие угловые миноры отличны от нуля. В теореме 1.3.1 [2] получено множество из четырех методов вычисления собственных значений трехдиагональных матриц, у которых (и их итерационных матриц) все ведущие угловые миноры обоих типов отличны от нуля. При этом использована информация о диагональных элементах $B = C_3^{-1}$ -матриц обратных к $C_3(I)$.

Во второй главе, которая состоит из трех параграфов, рассмотрены проблемы повышения скорости сходимости, снятия ограничений на ненулевые ведущие угловые миноры и на различие всех собственных значений в спектре трехдиагональных матриц. Решена также проблема оптимального выбора ускоряющих сдвигов. В § 2.1 выполнены модификации (теоремы 2.1.1 и 2.1.2) [3] методов, полученных в первой главе, на основе стратегий ускорения (2) и (3). После такой модификации, например, $T_d d$ - и $T_d d$ -методы становятся уже $T_d W d$ - и $T_d W d$ -методами соответственно. При этом учтена тройная роль сдвигов в $LR(RL)$ -методах. А именно, с помощью специальным образом подобранных сдвигов достигается ускорение сходимости, решаются проблемы нулевых миноров и сохранения трехдиагонального вида исходной матрицы и в процессе итераций. Итак, в § 2.1 получено множество ускоренных методов вычисления полного спектра трехдиагональных матриц общего вида, которые имеют различные собственные значения. В § 2.2 предложены эффективные способы (теорема 2.2.1) [3] выбора \tilde{W} -ускоряющих сдвигов

$$\tilde{W}_j = \tilde{q}_j - \tilde{p}_j \tilde{z}_j / \tilde{q}_{j+1}; \quad j = m, m-1, \dots, 2; \quad k = 1, 2, \dots \quad (16)$$

для модифицированных LR -методов и

$$\tilde{W}_j = \tilde{q}_{j+1} - \tilde{p}_j \tilde{z}_j / \tilde{q}_j; \quad j = 2, 3, \dots, m; \quad k = 1, 2, \dots \quad (17)$$

для модифицированных RL -методов, полученных в § 2.1. При этом в следствии 2.2.2 отмечено, что для $T_d W d$ -метода \tilde{W} -ускоряющие сдвиги выбираются в виде

$$\tilde{W}_j = \tilde{q}_j - (\tilde{q}_j - \tilde{W}_j - \tilde{T}_j) \cdot \tilde{T}_j - \tilde{q}_{j+1}^{(k)}; \quad \tilde{W}_j = 0; \quad j = m, \dots, 2; \quad k = 1, 2, \dots \quad (18)$$

а для $T_d W d$ -метода \tilde{W}_j выбираются в виде

$$\tilde{W}_j = \tilde{q}_{j+1}^{(k)} - (\tilde{q}_{j+1} - \tilde{W}_j - \tilde{T}_{j+1}) \cdot \tilde{T}_{j+1} - \tilde{q}_j^{(k)}; \quad \tilde{W}_j = 0; \quad j = 2, \dots, m; \quad k = 1, 2, \dots \quad (19)$$

При этом показано, что использование стратегии (2) приводит к кубическому ускорению сходимости модифицированных алгоритмов, а стратегии (3) - к квадратическому ускорению. В § 2.3 получены (теорема 2.3.1) [6] на основе анализа свойств сходимости LR -алгоритма эффективные способы вычисления полного спектра вещественных трехдиагональных матриц общего вида при наличии у них кратных или (и) комплексных собственных значений.

Третья глава состоит из двух параграфов. В этой главе рассмотрены методы [4] вычисления собственных (корневых) векторов трехдиагональных матриц $C_3(I)$ -общего вида произвольной структуры. В § 3.1 приведены методы (теорема 3.1.1) [4] отыскания собственных векторов при заданных собственных значениях трехдиагональных матриц общего вида, у которых все внедиагональные элементы отличны от нуля. При этом не накладываются никаких ограничений на ведущие угловые миноры $(C_3 \lambda E)$ -матрицы. Из множества полученных [4] в этом параграфе точных алгебраических представлений для собственных векторов $(U' \alpha) = \{u'_i \alpha\}_{i=1}^m$, где $U(\alpha) = U \omega \omega^{-1} U' \alpha$, имеем (в случае вещественных собственных значений) рекуррентные представления (следствие 3.1.2) [4] вида

1. Рекуррентный метод, основанный на нижних ведущих угловых минорах.

2. Рекуррентный метод, основанный на верхних ведущих угловых минорах.

$$\left. \begin{array}{l} \text{Если } U'_{i+1}(\alpha) \neq 0 \text{ и } 0 < |\tilde{L}_i(\alpha)| < \infty, \\ \text{то } -\frac{P_i}{\tilde{L}_i(\alpha)} U'_{i-1}(\alpha). \\ \text{Если } U'_{i+1}(\alpha) = 0 \text{ либо } \tilde{L}_i(\alpha) = 0, \\ \text{то } -\frac{P_{i-1}}{\tilde{L}_i} U'_{i-2}(\alpha). \\ \text{Если } \tilde{L}_i(\alpha) = \infty, \text{ то} \\ 0, \text{ где } U'_i(\alpha) = 1; \quad i = 2, 3, \dots, m \end{array} \right\} = U'_i(\alpha) = \left\{ \begin{array}{l} \text{Если } U'_{i+1}(\alpha) \neq 0 \text{ и } 0 < |\tilde{L}_i(\alpha)| < \infty, \\ \text{то } -\frac{\tilde{z}_{i+1}}{\tilde{L}_i(\alpha)} U'_{i+1}(\alpha). \\ \text{Если } U'_{i+1}(\alpha) = 0 \text{ либо } \tilde{L}_i(\alpha) = 0, \\ \text{то } -\frac{\tilde{z}_{i+2}}{\tilde{L}_{i+1}} U'_{i+2}(\alpha). \\ \text{Если } \tilde{L}_i(\alpha) = \infty, \text{ то} \\ 0, \text{ где } U'_m(\alpha) = 1; \quad i = m-1, \dots, 1 \end{array} \right. \quad (20)$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{Здесь: } \tilde{L}_i(\alpha) = q_i(\alpha) - P_i z_i / \tilde{L}_i(\alpha); \quad \tilde{L}_m(\alpha) = q_m(\alpha); \quad i = m, m-1, \dots, 2 \\ L_i(\alpha) = q_i(\alpha) - P_i z_i / L_i(\alpha); \quad L_1(\alpha) = q_1(\alpha); \quad i = 2, 3, \dots, m \\ \{q_n(\alpha) = (q_n - \lambda)\}_{n=1}^m \end{array} \right\} \quad (21)$$

В этом же параграфе приводится метод вычислений собственных векторов для таких матриц и при наличии у них комплексных собственных значений. Наличие нулевых внедиагональных элементов у трехдиагональных матриц $C_3(I)$ общего вида существенным образом влияет на структуру пространства собственных векторов таких матриц. В § 3.2 получен обобщенный метод (теорема 3.2.1) [4] вычисления собственных (корневых) векторов вещественных трехдиагональных матриц общего вида произвольной структуры. Доказательство теоремы 3.2.1 существенным образом опирается на разбиение исходной матрицы на несвязанные трехдиагональные подматрицы и связанные блоки, а также на анализ структуры пространства их собственных векторов на основе леммы 3.2.1 ([4]) и следствия 3.2.1 [4].

Четвертая глава состоит также из двух параграфов. В этой главе рассмотрены способы выбора ускоряющих сдвигов (как обобщение полученных методов для трехдиагональных матриц) при поиске всех собственных значений пяти- и семидиагональных матриц общего вида $C_5(I)$ и $C_7(I)$, а также методы вычисления их кратных и комплексных собственных значений на основе LR-метода. В § 4.1 доказаны теоремы 4.1.1 [8] и 4.1.2 [8]. В теореме 4.1.1 предложен следующий способ выбора ускоряющих сдвигов при поиске всех собственных значений пятидиагональных матриц $C_5(I)$

$${}_5\tilde{W}_i = \begin{cases} 0, \text{ если } |\tilde{P}_i| > 1 \\ \tilde{q}_i - (\tilde{b}_i \cdot a_i) \cdot \tilde{q}_{i-1}^{\infty}, & \text{ если } |\tilde{P}_i| < 1 \text{ и } 1 > |\tilde{b}_i| > \varepsilon \\ \tilde{q}_i - (\tilde{P}_i \cdot \tilde{z}_i) \cdot \tilde{q}_{i-1}^{\infty}, & \text{ если } |\tilde{P}_i| < 1 \text{ и } |\tilde{b}_i| \leq \varepsilon \end{cases} \quad (22)$$

и доказана при этом кубическая (квадратическая) сходимость соответственно для стратегии (2) и (3) LR-метода. В теореме 4.1.2 показано, что если в LR-методе для вычисления собственных значений семидиагональных матриц $C_7(I)$ выбирать ${}_7\tilde{W}_i$ - ускоряющие сдвиги для любого $i = m, m-1, \dots, 2$ и $K=1, 2, \dots$ в виде

$${}_7\tilde{W}_i = \begin{cases} 0, \text{ если } |\tilde{P}_i| > 1, |\tilde{b}_i| > 1 \text{ и } |\tilde{z}_i| > 1 \\ \tilde{q}_i - \tilde{z}_i \cdot f_i \cdot \tilde{q}_{i-1}^{\infty}, & \text{ если } |\tilde{P}_i| < 1, |\tilde{b}_i| < 1 \text{ и } \varepsilon < |\tilde{z}_i| < 1 \\ \tilde{q}_i - \tilde{b}_i \cdot \tilde{a}_i \cdot \tilde{q}_{i-1}^{\infty}, & \text{ если } |\tilde{P}_i| < 1, |\tilde{z}_i| \leq \varepsilon \text{ и } \varepsilon < |\tilde{b}_i| < 1 \\ \tilde{q}_i - \tilde{P}_i \cdot \tilde{z}_i \cdot \tilde{q}_{i-1}^{\infty}, & \text{ если } |\tilde{z}_i| \leq \varepsilon, |\tilde{b}_i| \leq \varepsilon \text{ и } \varepsilon < |\tilde{P}_i| < 1, \end{cases} \quad (23)$$

то в ускоренном LR-методе можно также достичь квадратического (кубического) ускорения сходимости. Способы (22) и (23) выбора ускоряющих сдвигов в LR-алгоритме сохраняют как вещественность, так и ленточный вид исходной $C_5(I)$ и $C_7(I)$ -матриц и в процессе итераций. В § 4.2 получены также эффективные способы (теорема 4.2.1) [8] вычисления

полного спектра вещественных пяти- и семидиагональных матриц общего вида и при наличии у них кратных или (и) комплексных собственных значений.

Пятая глава, в которой приведены [5,7,9] описание системы программы на ФОРТРАНе для ЭВМ ЕС-1061(60) и результаты расчетов, состоит из трех параграфов. В § 5.1 приведено описание системы стандартных подпрограмм на ФОРТРАНе для вычисления собственных значений вещественных трех-, пяти- и семидиагональных матриц, а также собственных (корневых) векторов вещественных трехдиагональных матриц общего вида произвольной структуры. Все подпрограммы реализованы в арифметике с двойной точностью. В подпрограммах для вычисления собственных значений трехдиагональных матриц $C_3(I)$ использованы алгоритмы, полученные в § 2.1 и § 2.3, и ускоряющие сдвиги (I6)+(I9). Кроме того в описываемых подпрограммах для анализа характера спектра трехдиагональных подматриц порядка не выше 4, появляющихся на диагонали итерационных матриц \tilde{C} , использованы необходимые и достаточные условия, полученные в леммах 5,6 из [6]. Также в этих подпрограммах начальный d -сдвиг и d -сдвиги для снятия появления нулевых или близких к нулю ведущих угловых миноров в матрицах \tilde{C} выбираются следующим образом. Если в соответствующих методах (программах) появляются равенства $\{(\tilde{L}_{ik} = 0, \tilde{L}_i = 0), (\tilde{G}_{ik} = 0, \tilde{L}_i = 0), (\tilde{z}_i = 1, \tilde{z}_i = 1), (\tilde{z}_i = \tilde{z}_i, \tilde{P}_i = \tilde{z}_i)\}$ при любых i и k для матриц \tilde{C} , то при данном k итерационным образом в \tilde{C} добавляется единичная матрица до тех пор пока у матрицы \tilde{C} (при всех i) не окажется отмеченных выше равенств (см. Юс. [5]).

В подпрограммах для нахождения собственных (корневых) векторов трехдиагональных матриц использованы алгоритмы, полученные в следствиях 3.1.2 и 3.1.3 и в теореме 3.2.1 диссертации.

В подпрограммах для одновременного вычисления собственных значений и соответствующих им собственных (корневых) векторов трехдиагональных матриц $C_3(I)$ использованы указанные выше подпрограммы. Кроме этого в этих подпрограммах для вычисления присоединенных векторов использована также информация о геометрической кратности кратного собственного значения. Такая информация имеется в подпрограмме для вычисления собственных значений на основе результатов теоремы 2.3.1, лемм 2.3.2 и 3.2.1 и следствия 3.2.1, а также лемм 5 и 6 из [6]. В подпрограммах для вычисления собственных значений пяти- и семидиагональных матриц использован известный основной LR-алгоритм, отмеченный в § 4.1 диссертации, и ускоряющие сдвиги (22) и (23), а также результаты теоремы 4.2.1 диссертации и лемм 3+4 в [8]. В отмеченных выше подпрограммах для вычисления собственных значений трех-, пяти- и семидиагональных матриц не требуется дополнительной памяти ЭВМ кроме массивов для хранения элементов исходных матриц. В § 5.2 приведены [5,8,9] примеры тестовых расчетов

и таблицы сравнения результатов вычислений с результатами основных известных уже стандартных программ.

Для тестовых расчетов использованы различные симметричные матрицы, у некоторых из которых известны точные формулы для вычисления собственных значений и собственных векторов. Некоторые из тестовых симметричных матриц имеют приблизительно одинаковые собственные значения. Некоторые из несимметричных тестовых матриц имеют вещественные либо комплексные кратные собственные значения. Порядки тестовых матриц выбирались в диапазоне от 3 до 500.

Известные стандартные подпрограммы, в которых реализованы $QL(QR)$ -алгоритмы, методы бисекции и обратных итераций и т.д. и с результатами счета которых велось сравнение, выбирались из библиотеки "Дубна". Результаты анализа тестовых расчетов и таблиц вынесены в основные результаты.

В § 5.3 приведен пример семества положительно определенных трехдиагональных матриц, для которых итерационный процесс LR -алгоритма без использования сдвигов и перестановок не осуществим, т.е. прерывается.

В заключении к диссертации формулируются результаты представленных исследований.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Построено (на основе модификации $LR(RL)$ -алгоритмов) множество корректных ускоренных методов вычисления полного спектра трехдиагональных матриц, все собственные значения которых различны. При этом лучшими из построенных являются ($T_d Wd$ -, $T_c Wd$)-методы, у которых требуется $(m-1)$ -деление и $(m-1)$ -умножение на каждой итерации, а также не накладывается никаких ограничений на элементы исходной матрицы.

2. Получены эффективные универсальные способы выбора ускоряющих сдвигов при поиске всех собственных значений на основе LR -метода, сохраняющие вещественность и трехдиагональный вид исходной матрицы и в процессе итераций.

3. Получены эффективные способы вычисления полного спектра вещественных трехдиагональных матриц общего вида при наличии у них кратных или (и) комплексных собственных значений.

4. Получено множество точных мультипликативных и рекуррентных представлений для компонент собственных векторов без ограничений на поведение ведущих угловых миноров трехдиагональной матрицы $(C - \lambda E)$.

5. Получен обобщенный метод вычисления собственных (корневых) век-

торов вещественных трехдиагональных матриц общего вида произвольной структуры.

6. Получены эффективные способы выбора ускоряющих сдвигов при поиске всех собственных значений на основе LR -метода, сохраняющих пяти- и семидиагональный вид исходной вещественной матрицы и в процессе итераций.

7. Получены эффективные способы вычисления полного спектра вещественных пяти- и семидиагональных матриц общего вида при наличии у них кратных или (и) комплексных собственных значений.

8. Получены необходимые и достаточные условия вырожденности трехдиагональных матриц общего вида $\tilde{C}_3(I)$, ведущие угловые миноры которых (порядка менее m) отличны от нуля.

9. Создана система стандартных подпрограмм на ФОРТРАНе для ЭВМ ЕС-1061(60) вычисления собственных значений вещественных трех-, пяти- и семидиагональных матриц, а также собственных (корневых) векторов вещественных трехдиагональных матриц общего вида произвольной структуры. При этом лучшие из созданных подпрограмм характеризуются следующими основными показателями:

а) Время вычисления всех собственных значений с использованием новых подпрограмм в среднем более чем в 2 раза меньше чем с использованием подобных известных стандартных подпрограмм из библиотеки "Дубна".

в) Для сравнения полных затрат времени на вычисления имеет место соотношение $(\hat{t}_{\lambda, u(n)} / t_{\lambda, u(n)}) = K \approx 1 + \frac{m}{8}$, где $t_{\lambda, u(n)}$ и $\hat{t}_{\lambda, u(n)}$ - полное время вычисления всех собственных значений и собственных векторов в наших и соответственно в $QL(QR)$ -алгоритмах.

с) Среднее число итераций на одно собственное значение в новых методах не превосходит 4.

д) Невязка $\Delta = (C - \lambda E)U(\lambda)$ и $|\Delta S| = |\sum \lambda_i - tr C|$, вычисленные по результатам новых подпрограмм, как для симметричных матриц так и матриц, которые имеют кратные собственные значения, лучше чем у подобных известных стандартных подпрограмм.

ОПУБЛИКОВАННЫЕ РАБОТЫ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Г.А.Эмельяненко, Им Ён Сек. О компактных модификациях метода Бауэра для нахождения собственных значений трехдиагональных матриц. Препринт ОИЯИ, РИИ-88-451, Дубна, 1988.
2. Г.А.Эмельяненко, Им Ён Сек. Стратегия смещений и множества корректных методов вычисления собственных значений трехдиагональных мат-

- риц общего вида. Препринт ОИЯИ, РИ-88-452, Дубна, 1988.
3. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек. О множествах корректных ускоренных методов вычисления полного спектра трехдиагональных матриц общего вида. Препринт ОИЯИ, РИ-88-453, Дубна, 1988.
 4. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек. О методах нахождения собственных векторов вещественных трехдиагональных матриц. Препринт ОИЯИ, РИ-88-736, Дубна, 1988.
 5. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек. О системах программ на ФОРТРАНе ЭВМ ЕС-1061(60) для вычисления всех корневых векторов любых вещественных трехдиагональных матриц, а также полного спектра таких матриц простой структуры. Препринт ОИЯИ, РИ-88-787, Дубна, 1988.
 6. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек. Методы вычисления полного спектра вещественных трехдиагональных матриц общего вида произвольной структуры. Препринт ОИЯИ, РИ-88-920, Дубна, 1988.
 7. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек. О системе программ на ФОРТРАНе ЭВМ ЕС-1061(60) для вычисления собственных значений и корневых векторов вещественных трехдиагональных матриц общего вида произвольной структуры. Препринт ОИЯИ, РИ-88-921, Дубна, 1988.
 8. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек. О методах поиска всех собственных значений блочно-трехдиагональных, а также пяти- и семидиагональных матриц. Препринт ОИЯИ, РИ-89-543, Дубна, 1989.
 9. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек. Об эффективных методах и стандартных программах на ФОРТРАНе ЭВМ ЕС-1061(60) для вычисления всех собственных значений пяти- и семидиагональных матриц, а также матриц Хессенберга. Препринт ОИЯИ, РИ-89-544, Дубна, 1989.
 10. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек. Краткий обзор, анализ проблем и систематизация методов нахождения собственных значений и собственных векторов трех-, пяти-, семидиагональных и хессенберговских матриц. Деп. пуб. ОИЯИ, БИ-И-89-574, Дубна, 1989.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 декабря 1989 года.