ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

11 - 9373

А.А.Корнейчук

О ПРИМЕНЕНИИ ИТЕРАЦИОННОГО МЕТОДА ДИАГОНАЛИЗАЦИИ МАТРИЦ В СЛУЧАЕ БЛИЗКИХ И КРАТНЫХ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

1975

11 - 9373

А.А.Корнейчук

О ПРИМЕНЕНИИ ИТЕРАЦИОННОГО МЕТОДА ДИАГОНАЛИЗАЦИИ МАТРИЦ В СЛУЧАЕ БЛИЗКИХ И КРАТНЫХ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Направлено в "ЖВМ и МФ"

1. Постановка задачи

Дана матрица

$$K = D + G$$

порядка N , где D диагональна, а G - некоторая матрица, называемая возмущением. Требуется найти собственные значения и собственные векторы матрицы K , т.е. найти матрицу $I + W$ / I - единичная матрица/ и $D + H$ / H - диагональная матрица/, такие, что

$$(D+G)(I+W) = (I+W)(D+H). \qquad /1.1/$$

Введем матричные операции S и T следующим образом. $S(A)$ - диагональная матрица, главная диагональ которой совпадает с главной диагональю A, а $T(A) = A - S(A)$. Для того, чтобы однозначно задать собственные векторы матрицы $D+G$, потребуем, чтобы $I+W$ имела единицы на главной диагонали, т.е. дополним /1.1/ условием

$$S(W) = 0, \qquad /1.2/$$

а требование диагональности H выразим в виде

$$T(H) = 0. \qquad /1.3/$$

Итак, задача диагонализации матрицы $D+G$ формулируется в виде системы матричных уравнений /1.1/ - /1.3/.

2. *Итерационный процесс для случая некратных собственных значений* D

Матричное уравнение /1.1/ запишем в виде

$$S(H) = S(G + GW - WH + DW - WD), \tag{/2.1/}$$

$$T(DW - WD) = T(-G + H - GW + WH). \tag{/2.2/}$$

Так как H диагональна, то

$$S(H) = H.$$

Далее, так как D диагональна, то, как легко проверить,

$$S(DW - WD) = 0, \quad T(DW - WD) = DW - WD.$$

Не уменьшая общности рассмотрения, будем считать,что

$$S(G) = 0,$$

ибо в D+G всегда можно определить G так, что ее главная диагональ будет нулевой. Непосредственно проверяется, что из /1.2/ - /1.3/ следует

$$S(WH) = 0.$$

С учетом сделанных выше замечаний исходная система /1.1/ - /1.3/ оказывается эквивалентной следующей:

$$H = S(GW), \tag{/2.3/}$$

$$DW - WD = -T(G + GW - WH), \tag{/2.4/}$$

$$S(W) = 0, \quad T(H) = 0. \tag{/2.5/}$$

Для ее решения предлагается следующий итерационный процесс:

$$H_0 = W_0 = 0, \tag{/2.6/}$$

$$H_{p+1} = S(GW_p), \tag{/2.7/}$$

$$DW_{p+1} - W_{p+1}D = -T(G + GW_p - W_pH_p). \tag{/2.8/}$$

При этом W_{p+1} из /2.8/ находится следующим образом:

$$(W_{p+1})_{ij} = -(T(G + GW_p - W_pH_p))_{ij} / ((D)_{ii} - (D)_{jj}), \; i \neq j,$$

$$(W_{p+1})_{ii} = 0.$$

Условия /2.5/, как можно проверить, выполняются на всех итерациях.

3. *Ограниченность и сходимость итераций для случая некратных собственных значений* D

Теорема 1. Если Δ - минимальное расстояние между двумя собственными значениями D , α и β - некоторые положительные константы, связанные соотношением

$$\beta = \frac{(N-1)\alpha}{1 + (N-1)(\alpha + \alpha^2)}, \tag{/3.1/}$$

и

$$g = \max_{i,j} |(G)_{ij}| \leq \frac{\beta\Delta}{N-1}, \tag{/3.2/}$$

то итерации /2.7/ - /2.8/ с начальными условиями /2.6/ ограничены:

$$|(W_p)_{ij}| \leq \alpha, \quad |(H_p)_{ij}| \leq (N-1)\alpha g. \tag{/3.3/}$$

Если при этом

$$g < \frac{\Delta}{(N-1)(2+\alpha)}, \tag{/3.4/}$$

то итерации сходятся не медленнее, чем геометрическая прогрессия со знаменателем

$$\theta = \sqrt{\frac{N-1}{\Delta}(2+\alpha)} < 1. \tag{/3.5/}$$

Доказательство. Из /2.7/ - /2.8/, учитывая, что G имеет в каждой строке не более N–1 ненулевых элементов, а H - не более одного элемента, нетрудно установить, что последовательности h_p, w_p, $p = 0,1,\ldots,$ удовлетворяющие рекуррентным соотношениям

$$h_{p+1} = (N-1) g w_p \ , \qquad /3.6/$$

$$w_{p+1} = \frac{1}{\Delta}(g + w_p h_p + (N-1) g w_p), \qquad /3.7/$$

мажорируют соответственно $|(H_p)_{ij}|$ и $|(W_p)_{ij}|$.

Далее, пусть для $k=0,1,\ldots,p$ уже установлено, что

$$w_k \le \alpha \ , \quad h_k \le (N-1)\alpha g \ .$$

Тогда из /3.1/ - /3.5/ следует, что

$$h_{p+1} \le (N-1)\alpha g \ , \quad w_{p+1} \le \alpha \ ,$$

и тем самым ограниченность итераций /2.7/ - /2.8/ неравенствами /3.3/ доказана.

Для доказательства сходимости итераций заметим, что δ_p, ϵ_p, $p=0,1,\ldots,$ удовлетворяющие рекуррентным соотношениям

$$\delta_{p+1} = (N-1) g \epsilon_p \ , \qquad /3.8/$$

$$\epsilon_{p+1} = \frac{1}{\Delta}(w_p \delta_p + ((N-1) g + h_{p-1}) \ \epsilon_p), \qquad /3.9/$$

мажорируют соответственно $|(H_p - H_{p-1})_{ij}|$ и $|(W_p - W_{p-1})_{ij}|$.

Пусть для $k=0,1,\ldots,p$ уже установлено, что

$$\epsilon_k \le c\theta^k .$$

Тогда, используя то, что $\epsilon_p < \epsilon_{p-1}$, из /3.1/ - /3.7/ находим, что

$$\epsilon_{p+1} \le \theta^2 \epsilon_{p-1} \ ,$$

откуда ввиду того, что $\theta < 1$, следует сходимость итераций /2.7/ - /2.8/.

4. Итерационный процесс для случая кратных и близких собственных значений D

Если матрица D имеет кратные собственные значения, предложенный выше итерационный процесс /2.6/ - /2.8/ должен быть несколько видоизменен.

S(A) определяется как операция вырезания из матрицы A квадратных блоков вокруг главной диагонали; размеры этих блоков равны кратностям собственных значений D . Так, например, если есть только одна пара кратных собственных значений $(D)_{11} = (D)_{22}$, то матрица S(A) имеет

$$(S(A))_{ij} = (A)_{ij} \ , \quad i=1,2, \ j=1,2 \ ;$$

$$(S(A))_{ii} = (A)_{ii} \ , \quad i=3,4,\ldots,N \ .$$

Остальные элементы S(A) - нули. T(A) определяется как A−S(A). Таким образом, хотя система матричных уравнений /1.1/ - /1.3/ формально сохраняется, исходная постановка задачи видоизменяется: матрица D+G приводится к блочно-диагональному виду в соответствии с наличием в D кратных собственных значений.

Система уравнений /1.1/ - /1.3/ приводится к виду

$$H = S(G + GW - WH), \qquad /4.1/$$

$$DW - WD = -T(G + GW - WH) \ , \qquad /4.2/$$

$$S(W) = 0, \quad T(H) = 0, \qquad /4.3/$$

и для ее решения предлагается итерационный процесс

$$H_0 = W_0 = 0, \qquad /4.4/$$

$$H_{p+1} = S(G + GW_p - W_p H_p), \qquad /4.5/$$

$$DW_{p+1} - W_{p+1} D = -T(G + GW_p - W_p H_p). \qquad /4.6/$$

При этом W_{p+1} из /4.6/ находится следующим образом:

$$(W_{p+1})_{ij} = -(T(G + GW_p - W_p H_p))_{ij} \ / ((D)_{ii} - (D)_{jj}),$$

если

$$(D)_{ii} \ne (D)_{jj} \ ,$$

иначе

$$(W_{p+1})_{ij} = 0.$$

Случай близких собственных значений матрицы D сводится к случаю кратных собственных значений путем перераспределения между D и G элементов главной диагонали матрицы $D+G$.

5. *Ограниченность и сходимость итераций для случая кратных собственных значений D*

Теорема 2. Если Δ - минимальное расстояние между различными собственными значениями матрицы D, α и β - некоторые положительные константы, связанные соотношением

$$\beta = \alpha \frac{1-\alpha}{1+\alpha}, \qquad /5.1/$$

и

$$g \le \frac{\beta\Delta}{N}, \qquad /5.2/$$

то итерации /4.4/ - /4.6/ ограничены сверху величинами

$$|(W_p)_{ij}| \le \frac{\alpha}{N}, \quad |(H_p)_{ij}| \le \frac{\alpha\Delta}{N}. \qquad /5.3/$$

Если при этом

$$2\alpha+\beta < 1, \qquad /5.4/$$

то итерации сходятся не медленнее, чем геометрическая прогрессия со знаменателем $2\alpha+\beta$.

Доказательство. Подобно тому, как это сделано при доказательстве теоремы 1, убеждаемся, что h_p, w_p, удовлетворяющие рекуррентным соотношениям

$$h_{p+1} = g + Ngw_p + Nw_p h_p, \qquad /5.5/$$

$$w_{p+1} = \frac{1}{\Delta}(g + Ngw_p + Nw_p h_p), \qquad /5.6/$$

мажорируют соответственно $|(H_p)_{ij}|$ и $|(W_p)_{ij}|$, а δ_p и ϵ_p, удовлетворяющие соотношениям

$$\delta_{p+1} = Ng\epsilon_p + Nw_p\delta_p + Nh_{p-1}\epsilon_p, \qquad /5.7/$$

$$\epsilon_{p+1} = \frac{1}{\Delta}(Ng\epsilon_p + Nw_p\delta_p + Nh_{p-1}\epsilon_p), \qquad /5.8/$$

мажорируют соответственно $|(H_p - H_{p-1})_{ij}|$ и $|(W_p - W_{p-1})_{ij}|$.

На основании /5.5/ - /5.6/ и /5.1/ - /5.2/ убеждаемся в том, что имеет место условие ограниченности /5.3/, а из /5.7/ - /5.8/ находим, что

$$\delta_k \le c(2\alpha+\beta)^k,$$

$$\epsilon_k \le \frac{c}{\Delta}(2\alpha+\beta)^k,$$

откуда следует сходимость итераций /4.4/ - /4.6/ при выполнении условия /5.4/.

6. *Сравнение с известными методами диагонализации*

Предложенные в настоящей работе варианты итерационного метода решения задачи на собственные значения представляют собой разновидности метода возмущений, широко используемого в квантовой механике /см., например, [1] стр. 161/.

Для случая некратных собственных значений матрицы D изложенный здесь метод несколько отличается от предложенного ранее итерационного метода [2] и его варианта для возмущений малого ранга [3].

Известный метод уточнения полной проблемы собственных значений /см. [4], стр. 200 и [5], стр. 344/ фактически является первой итерацией метода, предложенного в [2] и в настоящей работе.

Литература

1. *Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика /нерелятивистская теория/. Физматгиз, М., 1963.*
2. *А.А.Корнейчук, Н.Ю.Ширикова. Итерационный метод решения задач об отыскании собственных значений. Сб. материалов Совещания по программированию и*

математическим методам решения физических задач. ОИЯИ, Д10-7707, Дубна, 1974.
3. *А.А.Корнейчук. Об обращении и диагонализации матриц с возмущениями малого ранга. Препринт ОИЯИ, 11-9313, Дубна, 1975.*
4. *В.В.Воеводин. Численные методы алгебры. Наука, М., 1966.*
5. *Д.К.Фаддеев, В.Н.Фаддеева. Вычислительные методы линейной алгебры. Физматгиз, М.-Л., 1963.*

Рукопись поступила в издательский отдел
11 декабря 1975 года.