ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

5 - 9755

А.А.Корнейчук

ИТЕРАЦИОННЫЙ МЕТОД ОТДЕЛЕНИЯ ГРУППЫ БЛИЗКИХ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ МАТРИЦЫ

1976

5 - 9755

А.А.Корнейчук

ИТЕРАЦИОННЫЙ МЕТОД ОТДЕЛЕНИЯ ГРУППЫ БЛИЗКИХ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ МАТРИЦЫ

Направлено в ЖВМ и МФ

Корнейчук А.А.

5 - 9755

Итерационный метод отделения группы близких собственных значений матрицы

Предлагается итерационный метод отделения группы близких собственных значений матрицы, представляющей собой сумму диагональной матрицы и некоторого возмущения. Доказана сходимость метода для возмущений, норма которых есть величина порядка минимума расстояния между отделяемой группой собственных значений и остальными собственными значениями невозмущенной матрицы.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований

Дубна 1976

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Дана матрица $D_{MM}+G_{MM}$ размера $M\times M$ (M строк, M столбцов), где D_{MM} диагональна, а G_{MM} - некоторая матрица, называемая возмущением. D_{MM} имеет группу из P близких собственных значений - диагональных элементов $(D_{MM})_{k_1k_1}, \ldots, (D_{MM})_{k_Pk_P}$, отделенную от остальных собственных значений D_{MM} некоторой величиной Δ. Требуется отделить группу из P близких собственных значений этой матрицы и свести задачу отыскания P собственных значений $D_{MM}+G_{MM}$ к диагонализации некоторой матрицы порядка P.

Пусть $N=M-P$, и множество целых чисел $\ell_1,\ell_2,\ldots,\ell_N$ дополняет $k_1,k_2,\ldots,k_P$ до $1,2,\ldots,M$. Рассмотрим матричное уравнение

$$(D_{MM}+G_{MM})(K_{MP}+K_{MN}W_{NP})=(K_{MP}+K_{MN}W_{NP})(D_{PP}+H_{PP}), \quad (1.1)$$

где

$$(K_{MP})_{mp}=\delta_{m,k_p},\ (K_{MN})_{mn}=\delta_{m,\ell_n},\ (K_{PM})_{pm}=\delta_{k_p,m},$$

$$(K_{NM})_{nm}=\delta_{\ell_n,m};\ m=1,2,\ldots,M;\ n=1,2,\ldots,N;\ p=1,2,\ldots,P;$$

$$D_{PP}=K_{PM}D_{MM}K_{MP},$$

W_{NP} и H_{PP} - неизвестные матрицы. Если W_{NP} и H_{PP} удовлетворяют уравнению (1.1), а преобразование

$$L_{PP}=U^{-1}_{PP}(D_{PP}+H_{PP})U_{PP}$$

приводит матрицу $D_{PP}+H_{PP}$ к диагональному виду, то

$$(D_{MM}+G_{MM})(K_{MP}+K_{MN}W_{NP})U_{PP}=(K_{MP}+K_{MN}W_{NP})U_{PP}L_{PP},$$

т.е. матрица $(K_{MP}+K_{MN}W_{NP})U_{PP}$ размера $M\times P$ представляет собой P собственных векторов матрицы $D_{MM}+G_{MM}$, а $(L_{PP})_{pp}$, $p=1,2,\ldots,P$ – P собственных значений, им соответствующих.

2. ИТЕРАЦИОННЫЙ ПРОЦЕСС

Для того чтобы получить из (1.1) формулу, пригодную для итераций, умножим (1.1) слева на K_{PM}. Учитывая, что

$$K_{PM}K_{MP}=I_{PP},\quad (I_{PP})_{ij}=\delta_{ij},\quad i,j=1,2,\ldots,P,$$

$$K_{PM}D_{MM}K_{MP}=D_{PP},\quad K_{PM}K_{MN}=0,\quad K_{PM}D_{MM}K_{MN}=0,$$

получим

$$H_{PP}=K_{PM}G_{MM}K_{MP}+K_{PM}G_{MM}K_{MN}W_{NP}. \tag{2.1}$$

Подобным же образом, умножая (1.1) слева на K_{NM} и учитывая, что

$$K_{NM}D_{MM}K_{MP}=0,\qquad K_{NM}D_{MM}K_{MN}=D_{NN},\quad K_{NM}K_{MP}=0,$$

$$K_{NM}K_{MN}=I_{NN},\quad (I_{NN})_{ij}=\delta_{ij},\quad i,j=1,2,\ldots,N,$$

получим

$$D_{NN}W_{NP}-W_{NP}D_{PP}=W_{NP}H_{PP}-K_{NM}G_{MM}K_{MP}-K_{NM}G_{MM}K_{MN}W_{NP}.$$

Вводя обозначения

$$G_{PP}=K_{PM}G_{MM}K_{MP},\quad G_{PN}=K_{PM}G_{MM}K_{MP},$$

$$G_{NP}=K_{NM}G_{MM}K_{MP},\quad G_{NN}=K_{NM}G_{MM}K_{MN},$$

приходим к системе матричных уравнений

$$H_{PP}=G_{PP}+G_{PN}W_{NP}, \tag{2.2}$$

$$D_{NN}W_{NP}-W_{NP}D_{PP}=W_{NP}H_{PP}-G_{NP}-G_{NN}W_{NP}. \tag{2.3}$$

Можно убедиться, что система (2.2) – (2.3) эквивалентна уравнению (1.1) – для этого надо (2.2) умножить слева на $-K_{MP}$, а (2.3) – на K_{MN}, сложить полученные равенства и учесть, что

$$K_{MN}K_{NM}+K_{MP}K_{PM}=I_{MM},\quad (I_{MM})_{ij}=\delta_{ij},\quad i,j=1,2,\ldots,M.$$

Наконец, подставив (2.2) в (2.3), получаем уравнение

$$D_{NN}W_{NP}-W_{NP}D_{PP}=W_{NP}G_{PP}+W_{NP}G_{PN}W_{NP}-G_{NP}-G_{NN}W_{NP}, \tag{2.4}$$

пригодное для итераций:

$$(W^{q+1}_{NP})_{np}=(W^{q}_{NP}G_{PP}+W^{q}_{NP}G_{PN}W^{q}_{NP}-G_{NP}-G_{NN}W^{q}_{NP})_{np}/((D_{NN})_{nn}-(D_{PP})_{pp}), \tag{2.5}$$

$$n=1,2,\ldots,N;\quad p=1,2,\ldots,P;\quad q=0,1,\ldots;\quad W^{\circ}_{NP}=0.$$

3. ОГРАНИЧЕННОСТЬ ИТЕРАЦИЙ

Введем матричную норму (см. /1/ стр. 64)

$$||A||=\max_{j}\sum_{i}|(A)_{ij}|. \tag{3.1}$$

Известно, что

$$||AB||\le||A||\,||B||.$$

Далее, если W_{NP} – решение матричного уравнения

$$D_{NN}W_{NP}-W_{NP}D_{PP}=F_{NP},$$

то

$$(W_{NP})_{ij}=(F_{NP})_{ij}/((D_{NN})_{ii}-(D_{PP})_{jj}),\quad |(W_{NP})_{ij}|\le|(F_{NP})_{ij}|/\Delta,$$

где

$$\Delta=\min_{i,j}|(D_{NN})_{ii}-(D_{PP})_{jj}|,$$

и поэтому

$$||W_{NP}||\le||F_{NP}||/\Delta. \tag{3.2}$$

Учитывая (3.2), получаем

$$||W^{q+1}_{NP}||<(||G_{PN}||\,||W^{q}_{NP}||^{2}+(||G_{NN}||+||G_{PP}||)||W^{q}_{NP}||+||G_{NP}||)/\Delta.$$

Пусть

$$\Delta > ||G_{NN}|| + ||G_{PP}|| + 2\sqrt{||G_{PN}||\,||G_{NP}||}\,,$$

$$w = \frac{\Delta - ||G_{NN}|| - ||G_{PP}||}{2||G_{PN}||}\left(1 - \sqrt{1 - \frac{4||G_{PN}||\,||G_{NP}||}{(\Delta - ||G_{NN}|| - ||G_{PP}||)^2}}\right). \qquad (3.3)$$

Покажем, что

$$||W^q_{NP}|| \le w\,, \quad q = 0,1,\ldots \qquad (3.4)$$

Действительно, для W°_{NP} (3.4) справедливо. Полагая его справедливым для W^q_{NP}, получим

$$||W^{q+1}_{NP}|| < (||G_{PN}||\,w^2 + (||G_{NN}|| + ||G_{PP}||)\,w + ||G_{NP}||)/\Delta = w\,.$$

Тем самым ограниченность итераций (2.5) при условии (3.3) доказана.

4. СХОДИМОСТЬ ИТЕРАЦИЙ

Из (2.4) - (2.5) имеем

$$D_{NN}\,Z^{q+1}_{NP} - Z^{q+1}_{NP}D_{PP} = Z^q_{NP}G_{PN}W^q_{NP} + W^{q-1}_{NP}G_{PN}Z^q_{NP} + Z^q_{NP}G_{PP} - G_{NN}Z^q_{NP}\,,$$

где

$$Z^q_{NP} = W^q_{NP} - W^{q-1}_{NP}\,.$$

Поэтому

$$||Z^{q+1}_{NP}|| < (2||G_{PN}||\,w + ||G_{NN}|| + ||G_{PP}||)\,||Z^q_{NP}||/\Delta\,,$$

и итерации (2.5) будут сходиться, если

$$\Delta > 2||G_{PN}||\,w + ||G_{NN}|| + ||G_{PP}||\,. \qquad (4.1)$$

Покажем, что (4.1) следует из (3.3). Действительно, если (3.3) выполнено, то

$$\Delta - ||G_{NN}|| - ||G_{PP}|| > 0\,,$$

$$\frac{\Delta - ||G_{NN}|| - ||G_{PP}||}{2||G_{PN}||} - w = \frac{\Delta - ||G_{NN}|| - ||G_{PP}||}{2||G_{PN}||} \times$$

$$\times \sqrt{1 - \frac{4||G_{PN}||\,||G_{NP}||}{(\Delta - ||G_{NN}|| - ||G_{PP}||)^2}} > 0\,, \quad \Delta - ||G_{NN}|| - ||G_{PP}|| - 2||G_{PN}||\,w > 0.$$

Итак, итерации (2.5) сходятся, если выполнено условие (3.3).

5. УСТОЙЧИВОСТЬ ИТЕРАЦИЙ

Пусть в качестве результата q-й итерации по формуле (2.5) из-за погрешностей в вычислениях вместо матрицы W^q_{NP} получилась матрица $W^q_{NP} + Y^q_{NP}$. Оценим влияние этой ошибки на результат $q+1$-й итерации, которой обозначим через $W^{q+1}_{NP} + Y^{q+1}_{NP}$. Из (2.4)-(2.5), пренебрегая величинами порядка $||Y^q_{NP}||^2$, будем иметь:

$$||Y^{q+1}_{NP}|| \le ((||G_{NN}|| + ||G_{PP}|| + 2||G_{PN}||\,w)/\Delta)\,||Y^q_{NP}|| = \sigma||Y^q_{NP}||,$$

где $\sigma < 1$ в силу (4.1). Итак, итерации (2.5) при условии (3.3) устойчивы в том смысле, что влияние малой погрешности, сделанной на некоторой итерации, уменьшается на последующих итерациях.

6. СРАВНЕНИЕ С ИЗВЕСТНЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ

Предложенный в данной работе итерационный метод отделения группы близких собственных значений по своей идее близок к итерационному методу диагонализации матрицы, описанному в работе /2/. В данной работе, по сравнению с /2/, находятся не все собственные векторы одновременно, а только P из них, что предпочтительнее с точки зрения реализации алгоритма на ЭВМ. Анализ сходимости итерационного процесса упрощен по сравнению с /2/ и выполнен в терминах традиционных матричных норм.

Решение рассматриваемой в данной работе задачи связано со значительными трудностями для матриц большого порядка, для которых невозможно использовать традиционные подходы типа метода вращений Якоби из-за большого объема оперативной памяти, необходимой для хранения промежуточных результатов. Известные итерационные методы /1/, связанные с обращением матрицы $A-\tilde{\lambda}I$, где A - диагонализуемая матрица, а $\tilde{\lambda}$ - приближение к искомому собственному значению, неэффективны при наличии близких и кратных собственных значений. Итерационные методы типа $\bar{x}_{n+1} = A\bar{x}_n$ с ортогонализацией $\bar{x}_n$ по отношению к уже найденным собственным векторам в случае матриц большого порядка из-за трудностей с оперативной памятью ЭВМ оказываются пригодными лишь для нахождения нескольких собственных векторов, соответствующих наибольшим по модулю собственным значениям.

Следует подчеркнуть, что предложенный метод отделения группы близких собственных значений "возмущенной" матрицы требует лишь малости возмущения по норме. Наличие у "возмущенной" матрицы жордановых клеток либо комплексных собственных значений не препятствует применимости метода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дж.Х.Уилкинсон. Алгебраическая проблема собственных значений. Наука, М,. 1970.
2. А.А.Корнейчук. Препринт ОИЯИ, 11-9373, Дубна, 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 мая 1976 года.