объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р11-87-351

В.И.Коробов

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ДЛЯ СИММЕТРИЧНОЙ ОБОБЩЕННОЙ ЗАДАЧИ

Направлено в"Журнал вычислительной
математики и математической физики"

1987

Проблема регуляризации собственных значений играет существенную роль при решении задач математической физики вариационными методами с использованием неортогональных наборов опорных функций. Это связано с тем, что задача на собственные значения, возникающая при редукции вариационной проблемы к алгебраической, становится с ростом числа опорных функций близкой к сингулярной. При этом даже хорошо определенные собственные значения нижней части спектра начинают терять устойчивость к погрешностям вычислений [1]. В данной работе будет определен класс регуляризаторов, позволяющих решить проблему устойчивости.

I. Теория возмущений. Обзор результатов

Рассмотрим обобщенную задачу на собственные значения

$$Ax = \lambda Bx. \qquad (I)$$

Относительно A и B будем предполагать, что это симметричные вещественные матрицы размерности $n \times n$ и матрица B - положительно определенная. Известно [2], что такая пара матриц приводится к диагональному виду некоторой вещественной матрицей X:

$$A' = X^T A X \quad , \qquad B' = X^T B X \quad , \qquad (2)$$

где A' и B' диагональны, X^T обозначает транспонирование матрицы. При этом все собственные значения пары (A,B) определяются как отношение соответствующих диагональных элементов матриц A' и B', а столбцы матрицы X являются собственными векторами.

Занумеруем собственные значения в порядке возрастания: $\lambda_1 \le \lambda_2 \le \dots \le \lambda_n$. Экстремальными собственными значениями будем называть группу первых k (или последних k) собственных значений.

Собственные числа мы будем представлять парой чисел $[a,b]$, предполагая, что две пары $[a_1,b_1]$ и $[a_2,b_2]$ отвечают одному собственному значению λ, если $a_1/b_1 = a_2/b_2 = \lambda$. На двумерной плоскости при таком сопоставлении собственное значение представляется прямой, проходящей через начало координат. Определим хордовую метрику на множестве собственных значений:

$$\chi(\lambda_1,\lambda_2) = \chi([a_1,b_1],\ [a_2,b_2]) = \frac{|a_1 b_2 - a_2 b_1|}{\sqrt{a_1^2+b_1^2}\ \sqrt{a_2^2+b_2^2}} \ . \qquad (3)$$

Эта метрика - синус угла между двумя прямыми, представляющими соответственно собственные значения $\lambda_1 = [a_1,b_1]$ и $\lambda_2 = [a_2,b_2]$.

Введем некоторые числа. Как будет видно из дальнейшего, они являются различными характеристиками устойчивости задачи на собственные значения.

$$c_i(A,B) = \left[(x_i^T A x_i)^2 + (x_i^T B x_i)^2\right]^{1/2} / \|x_i\| \quad , \qquad (4а)$$

здесь x_i - i-й собственный вектор, $\|\cdot\|$ -евклидова норма в R^n.

$$c(A,B) = \inf\left\{\left[(x^T A x)^2 + (x^T B x)^2\right]^{1/2} : \|x\| = 1\right\} . \qquad (4б)$$

$$c_\chi(A,B) = \inf\left\{\left[(x^T A x)^2 + (x^T B x)^2\right]^{1/2} : \|x\| = 1 \ , \quad x \in \chi\right\} . \qquad (4в)$$

В последней формуле χ-подпространство R^n, обычно натянутое на группу первых (или последних) собственных векторов.

Мы будем рассматривать возмущенную задачу с парой матриц $(\bar A,\bar B) = (A+H, B+F)$ и величиной возмущения $\varepsilon = (\|H\|^2 + \|F\|^2)^{1/2}$, где $\|\cdot\|$ -норма матрицы, согласованная с евклидовой нормой в R^n. Собственные значения пары $(\bar A,\bar B)$ будем обозначать $\bar\lambda_i$.

В работе [3] Дж. Стюарт показал, что индивидуальная характеристика устойчивости собственных значений (4а) определяет чувствительность к воздействию возмущения в случае, когда собственное значение обладает изолированной обобщенной областью Гершгорина (подробнее определение см. в [3]). При этом имеет место следующая оценка:

$$\chi(\lambda_i,\bar\lambda_i) \le \frac{\varepsilon}{c_i(A,B)} + O(\varepsilon^2) \quad , \qquad (5)$$

и нелинейная поправка мала по сравнению с линейной частью.

Глобальная характеристика устойчивости $c(A,B)$ была введена Крауфордом [4]. При этом автор [4] расширяет класс рассматриваемых задач, заменяя условие положительной определенности матрицы в условием строгой положительности величины $c(A,B)$. В работе показано, что такая задача некоторым поворотом матриц

$$A\varphi = A\cos\varphi - B\sin\varphi$$
$$B\varphi = A\sin\varphi + B\cos\varphi$$

может быть приведена к задаче (I) с положительно определенной матрицей $B\varphi$. Такие задачи автор [4] называет определенными.

Наконец, Дж.Стюарт в работе [5] развил геометрическую технику, основанную на минимаксной характеризации собственных значений, которая позволила уточнить оценку, полученную в /4/.

Групповая характеристика устойчивости (4в) исследуется в следующем разделе, она также существенно использует геометрическую технику, к изложению которой мы сейчас и переходим.

2. Геометрическая теория возмущений

Пусть (A,B) – симметричная пара, соответствующая задаче (I). Определим угол θ как функцию от вектора x:

$$\theta(x)=\theta(x^TAx,x^TBx)=\mathrm{arctg}(x^TAx/x^TBx)\ . \qquad (6)$$

Собственные углы θ_i, соответствующие собственным векторам x_i, можно упорядочить по возрастанию $\theta_1\le\theta_2\le\ldots\le\theta_n$, и это упорядочивание взаимно однозначно с упорядочиванием собственных значений задачи (I), поэтому собственные углы θ_i допускают аналогичное минимаксное определение.

Теорема I /5/. Пусть собственные углы пары (A,B) упорядочены так, что $\theta_1\le\theta_2\le\ldots\le\theta_n$. Тогда

$$\theta_i=\min_{\dim(\chi)=i}\ \max_{\substack{x\in\chi\\ \|x\|=1}}\theta(x^TAx,x^TBx)\ ; \qquad (7а)$$

$$\theta_i=\max_{\dim(\chi)=n-i+1}\ \min_{\substack{x\in\chi\\ \|x\|=1}}\theta(x^TAx,x^TBx)\ . \qquad (7б)$$

Рассмотрим теперь возмущенную задачу.

Теорема 2 /5/. Пусть (A,B) – симметричная пара и матрица B – положительно определенная. Пусть

$$\varepsilon=\left[\|H\|^2+\|F\|^2\right]^{1/2} \quad \text{и} \quad \varepsilon<c(A,B)\ .$$

Тогда пара $(\bar A,\bar B)=(A+H,B+F)$ диагонализируема и допускает минимаксную характеризацию собственных углов. При этом верны оценки

$$|\theta_i-\bar\theta_i|\le\arcsin\left[\varepsilon/c(A,B)\right] \qquad (8а)$$

или

$$\chi(\lambda_i,\bar\lambda_i)\le\varepsilon/c(A,B)\ . \qquad (8б)$$

Пусть χ_k – подпространство, образованное собственными векторами $x_1,x_2,\ldots,x_k$, оно является минимизирующим для собственного угла θ_k в следующем смысле:

$$\theta_k=\min_{\dim(\chi)=k}\ \max_{\substack{x\in\chi\\ \|x\|=1}}\theta(x^TAx,x^TBx)=\max_{\substack{x\in\chi_k\\ \|x\|=1}}\theta(x^TAx,x^TBx)\ .$$

Теорема 3. Пусть (A,B) – симметричная пара и матрица B – положительно определенная. Пусть возмущенная пара $(\bar A,\bar B)=(A+H,B+F)$ диагонализируема и допускает минимаксную характеризацию собственных углов и

$$\varepsilon=\left[\|H\|^2+\|F\|^2\right]^{1/2}<c_{\chi_k}(A,B)\ .$$

Тогда

$$\bar\theta_i\le\theta_i+\arcsin\left[\varepsilon/c_{\chi_k}(A,B)\right] \quad \text{при} \quad i=1,2,\ldots,k\ . \qquad (9)$$

Доказательство. Рассмотрим множество

$$V\chi_k=\left\{[x^TAx,x^TBx]\ :\ \|x\|=1,\ \ x\in\chi_k\right\}\ ;$$

сравните это множество с множеством V, определенным в /5/. Оно лежит в верхней полуплоскости и левее луча θ_k (рис.I). При этом расстояние от начала координат до множества $V\chi_k$ равняется $c_{\chi_k}(A,B)$. Из сказанного следует, что верна цепочка неравенств:

$$\bar\theta_k=\min_{\dim(\chi)=k}\ \max_{\substack{x\in\chi\\ \|x\|=1}}\theta(x^T(A+H)x\ ,\ x^T(B+F)x)\le$$

$$\le\max_{\substack{x\in\chi\\ \|x\|=1}}\theta(x^T(A+H)x\ ,\ x^T(B+F)x)\le$$

$$\le\max_{x\in\chi}\left\{\theta(x^TAx+\varepsilon_1\ ,\ x^TBx+\varepsilon_2):\|x\|=1,\ \varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2=\varepsilon^2\right\}\le$$

$$\le\theta_k+\arcsin\left[\varepsilon/c_{\chi_k}(A,B)\right]\ .$$

Чтобы доказать неравенство (9) при $i<k$, достаточно заметить, что $c_{\chi_i}(A,B)\geq c_{\chi_k}(A,B)$. Доказательство закончено.

Как следует из теоремы 3, если $\varepsilon\ll c_{\chi_k}(A,B)$, то собственные значения группы первых k собственных векторов не могут сильно возрасти при переходе к возмущенной задаче. К сожалению, условие хорошей обусловленности не гарантирует устойчивости в направлении убывания. Это видно из следующего примера.

Пример. Пусть имеется пара матриц:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \delta^2 \end{pmatrix},$$

и возмущенная пара:

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} 1 & \delta \\ \delta & \delta^2 \end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \delta^2 \end{pmatrix},$$

где δ - малый параметр. Собственные значения легко вычисляются из характеристического многочлена и равны соответственно $(1, 1/\delta)$ для пары (A,B) и $(0,2)$ для возмущенной пары. При этом матрица возмущения имеет норму порядка δ, а первое собственное значение имеет характеристику устойчивости $c_1(A,B) = \sqrt{2} >> \delta$.

Этот пример наглядно показывает, насколько опасно вычислять собственные значения задачи, не будучи уверенным в устойчивости вычислений.

3. Методы регуляризации

В предыдущем пункте было показано, что собственные значения теряют устойчивость, как только глобальная характеристика устойчивости $c(A,B)$ становится меньше величины возмущения ε. Это приводит к необходимости построения регуляризующих процедур решения задачи. Как было отмечено в [6], при разработке регуляризующих алгоритмов существенную роль играет априорная информация. В данной работе мы будем предполагать, что собственные значения начальной части спектра хорошо определены, это означает, что выполнено условие $c\chi_k(A,B) >> \varepsilon$ для некоторого k.

Для того чтобы определить, что же влияет на устойчивость задачи, рассмотрим множество

$$V\bar{\chi}_k = \left\{ [x^TAx, x^TBx] : \|x\| = 1, \ x \in \bar{\chi}_k \right\},$$

где $\bar{\chi}_k$ - подпространство R^n, образованное собственными векторами $x_k, x_{k+1}, \dots, x_n$. Основываясь на этом множестве, мы можем получить оценку, аналогичную оценке (9) из теоремы 3:

$$\bar{\theta}_i \geq \theta_i - \arcsin[\varepsilon / c\bar{\chi}_k(A,B)],$$

справедливую, пока $c\bar{\chi}_k(A,B) > \varepsilon$, но теряющую смысл, как только $c\bar{\chi}_k(A,B)$ становится меньше ε. Множество $V\bar{\chi}_k$ в этом случае имеет точки, близко расположенные к началу координат.

Основная идея регуляризации состоит в том, чтобы отодвинуть множество $V\bar{\chi}_k$ от начала координат. При этом необходимо, чтобы гло-

бальная характеристика устойчивости стала больше величины возмущения ε и собственные значения верхней неустойчивой части спектра не оказывали существенного влияния на интересующие нас собственные значения. Говоря на языке работы [3], области Гершгорина возмущенной задачи для нижней и верхней частей спектра должны быть разделены.

Введем класс регуляризаторов:

$$A_R = A + s\alpha E, \quad B_R = B + s\beta E, \tag{10}$$

где (α, β) - вектор регуляризации, такой, что $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ и $\beta \geq 0$, а s - параметр регуляризации.

Теорема 4. Пусть (α, β) - вектор регуляризации, такой, что $\theta_k < \theta(\alpha, \beta)$, где θ_k - собственный угол пары (A,B). Тогда верны неравенства

$$\theta_i \leq \theta_i(A_R, B_R) \leq \theta_i + \arcsin[s / c\chi_k(A,B)] \quad \text{при} \quad i \leq k, \tag{11}$$

где $\theta_i(A_R, B_R)$ - i-й собственный угол регуляризованной пары (A_R, B_R) и s-параметр регуляризации.

Доказательство. Правое неравенство в (11) следует из теоремы 3. Чтобы доказать левое неравенство, заметим, что множество $V\chi_k$ лежит правее собственного угла θ_i (рис.2) и $\theta_i < \theta(\alpha, \beta)$. Поэтому

$$\theta_i(A_R, B_R) = \max_{\dim(\chi) = n-i+1} \ \min_{\substack{x \in \chi \\ \|x\| = 1}} \theta(x^TA_Rx, x^TB_Rx) \geq$$

$$\geq \min_{\substack{x \in \bar{\chi}_i \\ \|x\| = 1}} \theta(x^TA_Rx, x^TB_Rx) \geq$$

$$\geq \min_{\substack{x \in \bar{\chi}_i \\ \|x\| = 1}} \theta(x^TAx, x^TBx) = \theta_i,$$

что и требовалось доказать.

Подбирая надлежащим образом вектор регуляризации (α, β) и параметр s, можно добиться того, чтобы первые k собственных значений пары (A_R, B_R) были устойчивы к возмущениям в смысле оценки (5). Тогда найденные решения будут удовлетворять неравенствам

$$\theta_i - \arcsin[\varepsilon/c_i(A,B)] + O(\varepsilon^2) \leq \bar{\theta}_i^R \leq$$

$$\leq \theta_i + \arcsin[s/c_{\chi_k}(A,B)] + \arcsin[\varepsilon/c_i(A,B)] + O(\varepsilon^2) \qquad (12)$$

и нелинейная поправка мала по сравнению с линейной частью в (12).

Возвращаясь к примеру предыдущего раздела, покажем, как регуляризатор позволяет избавиться от нежелательной неустойчивости. Введем для этого регуляризатор $c(\alpha, \beta) = (2/\sqrt{5}, 1/\sqrt{5})$ и $s = \sqrt{5}/2$, тогда возмущенная регуляризованная пара имеет вид

$$\bar{A}_R = \begin{pmatrix} 1+\delta & \delta \\ \delta & \delta/(1+\delta) \end{pmatrix}, \qquad \bar{B}_R = \begin{pmatrix} 1+\delta/2 & 0 \\ 0 & \delta(1/2+\delta) \end{pmatrix}.$$

Первое собственное значение пары $(\bar{A}_R, \bar{B}_R)$ равно $1-3/2\,\delta + O(\delta^2)$.

4. Заключение

Наибольший интерес представляет использование регуляризующих процедур на практике. Выбор конкретного алгоритма решения задачи на собственные значения во многом определяет характеристики регуляризатора.

Наиболее устойчивым алгоритмом является метод обратной итерации. Даже в случае сильновырожденных систем он дает хорошие оценки собственных значений, хотя качество вектора решения в отсутствие регуляризатора может заметно падать. При использовании метода обратной итерации целесообразно выбирать значение параметра регуляризации, сравнимое по величине с ошибками округления или, соответственно, с погрешностью вычисления элементов матриц, если элементы не могут быть посчитаны с машинной точностью.

Следует остерегаться использования алгоритмов приведения обобщенной задачи к стандартному виду [2]. В работе [7] показано, что даже хорошо обусловленные задачи ($\varepsilon << c(A,B)$) теряют устойчивость при использовании подобных методов, как только матрица B становится близкой к сингулярной. Отметим, что значение $c(A,B)$ может быть большим, даже если B вырождена. В этом случае появляются собственные числа, имеющие бесконечные значения.

При использовании регуляризующих алгоритмов в вариационных задачах математической физики полезным фактом является сохранение свойства оценки быть оценкой сверху. Это очевидное следствие теоремы 4.

Регуляризующие алгоритмы использовались в практических расчетах энергий связи квантово-механической задачи трех тел вариационными

методами [8]. Это позволило продвинуть мощность вычислений с 400 опорных функций до порядка 1500 опорных функций и получить прецизионные результаты в задачах мезокатализа. Расчеты производились на ЭВМ ЕС-1061.

В заключение автор хочет поблагодарить И.В.Пузынина и П.Г.Акишина за полезные обсуждения работы.

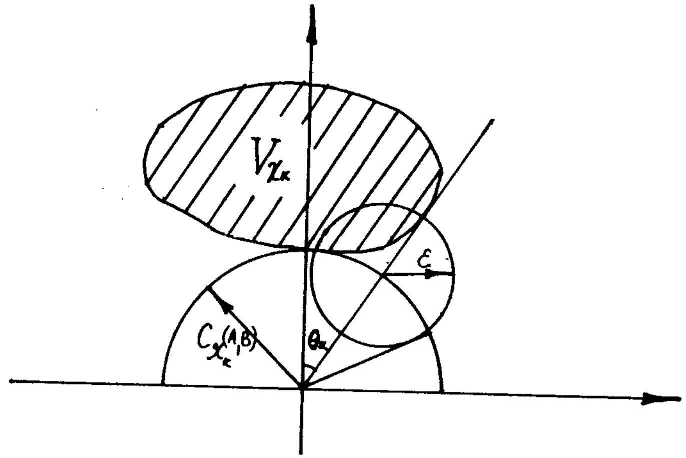

Рис.1

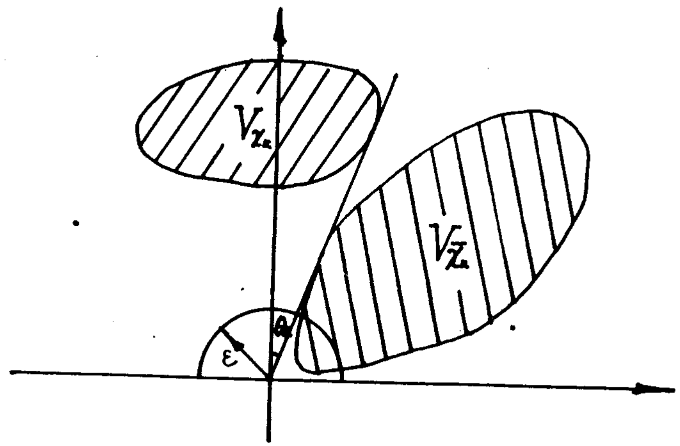

Рис.2

Литература

1. Bhatia A.K., Drachman R.J. Variational calculations of muonic-molecule energy levels.-Phys.Rev.A,1984,v.30,No5,p.2138-2140.
2. Парлетт Б. Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. М., Мир, 1983.
3. Stewart G.W. Gershgorin theory for the Generalized Eigenvalue Problem $Ax=\lambda Bx$.-Math. Comp.,1975,v.29,No.130,p.600-606.
4. Crawford C.R. A stable generalized eigenvalue problem.- SIAM J. on Numer. Anal.,1976,v.13, No.6, p.854-860.
5. Stewart G.W. Perturbation bounds for the definite generalized eigenvalue problem.-Lin. Alg. and Its Appl.,1979,v.23,p.69-85.
6. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М., Наука, 1979.
7. Fix G., Heiberger R. An algorithm for the illconditioned generalized eigenvalue problem. - SIAM J. on Numer. Anal., 1972, v. 9, No. 1, p. 78-88.
8. Виницкий С.И., Коробов В.И., Пузынин И.В. Вариационный расчет уровней энергии μ-мезомолекул изотопов водорода.-ЖЭТФ, 1986, т.91, вып.9, с.705-714.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 мая 1987 года.

Коробов В.И. P11-87-351
Регуляризация экстремальных собственных значений для симметричной обобщенной задачи

Приводится анализ теории возмущений для обобщенной задачи на собственные значения. Предлагаются методы регуляризации хорошо определенных экстремальных собственных значений в случае, когда сама задача почти сингулярна. Приводится пример использования регуляризации в вариационных задачах математической физики.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод О.С.Виноградовой

Korobov V.I. P11-87-351
Regularization of Extreme Eigenvalues for Symmetry Generalized Problem

Perturbation theory analysis for generalized eigenvalue problem is performed. Regularization methods for well-defined extreme eigenvalues are proposed for the case when the whole problem is nearly singular. An example of regularization usage in variational problems of mathematical physics is presented.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987