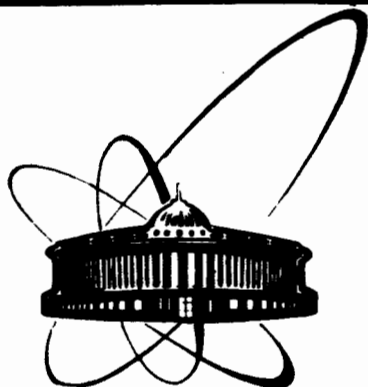


88-451.



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

E 601

P11-88-451 e

Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек

О КОМПАКТНЫХ МОДИФИКАЦИЯХ
МЕТОДА БАУЭРА
ДЛЯ НАХОЖДЕНИЯ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ
ТРЕХДИАГОНАЛЬНЫХ МАТРИЦ

Направлено в "Журнал вычислительной математики
и математической физики"

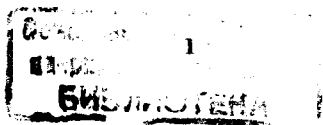
1988

1. Введение

Нельзя не согласиться с утверждением авторов монографии [1] о том, что ключевое место в линейной алгебре проблеме собственных значений обеспечивают две причины. Во-первых, это необходимость определения структуры собственных векторов матриц. Во-вторых, это корректное нахождение численных значений собственных чисел и векторов, что представляет сложную вычислительную проблему для многих конкретных задач, в том числе теоретической и математической физики. В предлагаемых работах мы остановимся на дополнительном анализе отдельных аспектов указанных проблем применительно лишь к трехдиагональным матрицам. Это обусловлено прежде всего практической возможностью сведения полной спектральной проблемы общих матриц к эквивалентной ей проблеме трехдиагональных (в общем случае несимметрических) матриц, например [1+4].

Нельзя не отметить также, что проблема собственных значений трехдиагональных матриц имеет (к тому же еще) принципиальное значение как для решения некорректных задач математической физики, например [5,6], так и для теории ортогональных многочленов, например [7+9]. Воспользовавшись анализом проблемы собственных значений и функций и библиографией [2,10+18], приведенных в монографии [1] (посвященной трехдиагональным матрицам), а также [2], [19,20] и [21-27] и не претендуя на более полное освещение имеющихся литературных источников, перейдем к нашему дополнительному анализу указанной проблемы. Но прежде всего отметим, что в имеющейся в настоящее время литературе (в том числе и в цитированной выше) значительное место занимают QR - и LR -алгоритмы, отличающиеся как скоростью сходимости, так и точностью разложения при близких собственных значениях, а также специфическими особенностями вычислительных процедур в случае трехдиагональных матриц, например [1]. Хотя в отечественной литературе метод последовательной факторизации Бауэра [20] и известен больше как LR -алгоритм, тем не менее, следуя [20], мы в дальнейшем будем употреблять как то, так и другое название.

В настоящей работе мы выполним ряд последовательных модификаций LR -алгоритма (в случае трехдиагональных матриц с отличными от нуля главными верхними угловыми минорами) и получим ряд эффективных численных процедур для нахождения собственных значений $\{\lambda_i\}$ таких матриц. Полученные алгоритмы, на наш взгляд, отличаются от известных нам ранее, легко модифицируются и для случая нулевых угловых миноров (в том числе вырожденных матриц). Как будет показано нами в этих работах, предлагаемые методы вычисления собственных значений и функций



тредиагональных (в общем случае несимметричных) матриц обладают некоторыми дополнительными достоинствами в сравнении с известными вариантами LR- и QR-алгоритмов при их численной реализации на ЭВМ. Всюду в настоящих работах мы стремились к формулировке теоретических результатов в виде, удобном для практической реализации их на ЭВМ. В основу всех дальнейших результатов были положены теоремы, доказанные в [4].

Итак, в [4] были получены следующие алгоритмы для вычисления главных угловых миноров (и, следовательно, детерминанта) трехдиагональных матриц^{x)}:

$$\Delta_1^j = \prod_{k=1}^j q_k \cdot \alpha_{j+1}, \quad \Delta_i^m = \prod_{k=i}^m q_k \cdot \beta_{i-1} \rightarrow (\det(C) = \Delta_1^m) = (\alpha_{m+1} = \beta_0) \cdot \prod_{k=1}^m q_k, \quad (I.1)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{i+1} &= \alpha_i - \gamma_i \alpha_{i-1} \\ \beta_{j-1} &= \beta_j - \gamma_{j+1} \beta_{j+1} \end{aligned} \right\} \iff \left\{ \begin{aligned} \alpha_{i+1} &= 1 - \sum_{k=1}^i \gamma_k \alpha_{k-1}; \quad \alpha_0 = \alpha_1 = \alpha_2 = 1; \quad i=1, 2, \dots, m, \\ \beta_{j-1} &= 1 - \sum_{k=j}^m \gamma_{k+1} \beta_{k+1}; \quad \beta_{m+1} = \beta_m = \beta_{m-1} = 1; \quad j=m, m-1, \dots, 1, \end{aligned} \right. \quad (I.2)$$

$$\gamma_k = \frac{p_k}{q_{k-1}} \cdot \frac{z_k}{q_k}; \quad \gamma_1 = \gamma_{m+1} = 0; \quad k=2, 3, \dots, m, \quad (I.3)$$

$\{q_k, p_k, z_k\}_{k=1, n-2}$ — элементы трехдиагональной матрицы

$$C = \begin{bmatrix} q_1 & z_1 & & & 0 \\ p_2 & q_2 & z_2 & & \\ & p_{m-1} & q_{m-1} & z_{m-1} & \\ 0 & & p_m & q_m & \\ & & & & \dots \end{bmatrix}, \quad \text{либо} \quad (I.4)$$

$$\Delta_1^j = \prod_{k=1}^j q_k \prod_{k=1}^j \Lambda_k, \quad \Delta_i^m = \prod_{k=i}^m q_k \prod_{k=i}^m \Gamma_k \implies \det(C) = \prod_{k=1}^m q_k \left(\prod_{k=1}^m \Lambda_k = \prod_{k=0}^m \Gamma_k \right), \quad \text{где} \quad (I.5)$$

$$\left. \begin{aligned} \Gamma_{i-1} &= 1 - \gamma_{i+1} \Gamma_i^{-1}; \quad \Gamma_m = \Gamma_{m-1} = 1; \quad i=m-1, \dots, 1, \\ \Lambda_{j+1} &= 1 - \gamma_j \Lambda_j^{-1}; \quad \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1; \quad j=2, 3, \dots, m, \end{aligned} \right\} \quad (I.6)$$

в если $\Lambda_j = 0$ или $\Gamma_i = 0$ — "изолированные" нули последовательностей (I.6), то

$$\left. \begin{aligned} \Lambda_{j-1} &= \delta_{j-1}, \quad \Lambda_{j+2} = 1, \quad \Lambda_{j+1} = \infty, & \text{но } \Lambda_j \cdot \Lambda_{j+1} &\equiv -\delta_j \\ \Gamma_{i+1} &= \delta_{i+2}, \quad \Gamma_{i-2} = 1, \quad \Gamma_{i-1} = \infty, & \text{но } \Gamma_{i-1} \cdot \Gamma_i &\equiv -\delta_{i+1} \end{aligned} \right\}, \quad (I.7)$$

где δ_i есть (I.3) и $\{q_i\}_{i=1}^m$ — диагональные элементы матрицы C (I.4). А также

x) Здесь и всюду далее Δ_1^j и Δ_i^m — главные угловые миноры-определители матриц, начинающихся с элементов q_1 и q_m матриц C (I.4) соответственно.

$$\left. \begin{aligned} \prod_{k=1}^m \Lambda_k &= \begin{cases} 0, & \text{если } \Lambda_{j+1} = 0 \\ \Lambda_1 \cdot \Lambda_2 \cdots (\Lambda_k \cdot \Lambda_{k+1}) \cdots \Lambda_j \cdot \Lambda_{j+1} \neq 0, & \text{если } \Lambda_k = 0 \text{ для любого } 1 \leq k \leq j \end{cases} \\ \prod_{k=1}^m \Gamma_k &= \begin{cases} 0, & \text{если } \Gamma_{i-1} = 0 \\ \Gamma_{i-1} \cdot \Gamma_i \cdots (\Gamma_{i-1} \cdot \Gamma_i) \cdots \Gamma_m \neq 0, & \text{если } \Gamma_k = 0 \text{ для любого } i \leq k \leq m-2 \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (I.8)$$

В дальнейшем при построении теории собственных значений и собственных векторов для матриц вида (I.4) мы существенным образом будем опираться на LR-метод (или, как отметили выше, на метод Бауэра [20]), сущность которого сводится к построению итерационных процедур^{xx)}, если собственные значения удовлетворяют условиям^{xx)}:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_m|. \quad (I.9)$$

В методе Бауэра [20], как известно, сначала строится итерационная процедура

$$A = L^{(k)} R^{(k)}, \quad (I.10)$$

которая затем используется для построения процедуры

$$A = R^{(k+1)} L^{(k)}, \quad (I.11)$$

где $A = A$ — заданная матрица, вообще говоря, произвольного вида (но в нашем случае вида C (I.4)), а $L^{(k)}$ и $R^{(k)}$ — треугольные матрицы, которые имеют следующую структуру (в общем случае):

$$L^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \ell_{21}^{(k)} & 1 & & & \\ \ell_{31}^{(k)} & \ell_{32}^{(k)} & 1 & & \\ \ell_{m1}^{(k)} & \ell_{m2}^{(k)} & \dots & \ell_{m,m-1}^{(k)} & 1 \end{bmatrix}, \quad R^{(k)} = \begin{bmatrix} r_{11}^{(k)} & r_{12}^{(k)} & \dots & r_{1m}^{(k)} \\ & r_{22}^{(k)} & \dots & r_{2m}^{(k)} \\ & & \dots & r_{mm}^{(k)} \\ & & & 0 & \dots & r_{mm}^{(k)} \end{bmatrix}. \quad (I.12)$$

При этом в методе Бауэра [20] показано, что имеют место предельные соотношения

$$\lim_{k \rightarrow \infty} r_{ii}^{(k)} = \lambda_i; \quad i=1, 2, \dots, m, \quad (I.13)$$

где λ_i — собственные значения данной матрицы A, а также соотношения

$$r_{ii}^{(k)} = \frac{\Delta_i^{(k)}}{\Delta_{i-1}^{(k)}}, \quad (I.14)$$

где $\Delta_i^{(k)}$ и $\Delta_{i-1}^{(k)}$ — верхние главные угловые миноры матрицы A соответственно порядков i и i-1, а $r_{ii}^{(k)}$ — диагональные элементы матрицы R (I.12), а также k — номер итерации.

x) Ниже мы приводим ряд основных моментов этого метода с целью полностью изложения (Леммы I и 2).

xx) Как будет показано в дальнейшем, мы снимем ограничения (I.9) и тем самым обобщим метод Бауэра.

В дальнейшем мы воспользуемся тем обстоятельством, что в отличие от матриц А общего вида матрицы С (I.4) имеют все нулевые элементы, кроме трех главных диагоналей, что приводит к двухдиагональным матрицам $\overset{(k)}{L}$ и $\overset{(k)}{R}$.

2. Представление метода Бауэра для трехдиагональных матриц с использованием явного вида верхних угловых главных миноров

Если учесть представления (I.5), (I.6) для угловых миноров матрицы С (I.4), а также отношения (I.I4) Бауэра для них, то можно показать справедливость следующего результата.

Теорема I. Если С (I.4) – трехдиагональная матрица с отличными от нуля вещественными¹⁾ элементами $\{q_i \neq 0, r_n \neq 0, p_n \neq 0\}_{i=1, n=2}^m$, все верхние угловые главные миноры которой отличны от нуля²⁾, то ее собственные значения могут быть найдены корректно³⁾ при⁴⁾ $\left\{ \left| \frac{p_i^{(k)}}{r_{i+1}^{(k)}} \right| < 1 \right\}_{i=2}^m$ с использованием следующего вычислительного процесса:

Метод I (Λ -метод). Если $|p_i| > \varepsilon$ ⁵⁾ для любых $k=1, 2, \dots$, то

$$\left. \begin{aligned} \delta_i &= \frac{p_i^{(k)}}{q_i} \cdot \frac{z_i^{(k)}}{q_{i-1}^{(k)}}; \delta_1 = \gamma_{m+1} = 0; i=2, 3, \dots, m, \\ \Lambda_{i+1} &= 1 - \delta_i \Lambda_i^{(k)}; \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1, \Lambda_{m+2} = 0; i=2, 3, \dots, m, \\ \Lambda_i &= q_i \Lambda_{i+1}^{(k)}; i=1, 2, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

$$\left. \begin{aligned} \lambda &= \lim_{k \rightarrow \infty} \Lambda_i^{(k)}; i=1, 2, \dots, m. \\ p_i &= \left[\frac{q_i^2}{z_i} \Lambda_{i+1}^{(k)} (1 - \Lambda_{i+1}^{(k)}) = \frac{q_i^2}{z_i} \delta_i \frac{\Lambda_{i+1}^{(k)}}{q_i} \right]; i=2, 3, \dots, m \\ q_i &= \left[q_i \Lambda_{i+1}^{(k)} + q_{i+1} (1 - \Lambda_{i+2}^{(k)}) = q_i \Lambda_{i+1}^{(k)} + \frac{p_{i+1}}{q_i} \frac{z_{i+1}}{q_i} \Lambda_{i+1}^{(k)} \right]; i=1, 2, \dots, m, \end{aligned} \right\} \quad (2.2)$$

- 1) Результаты настоящей теоремы без труда переносятся и на случай матриц С (I.4) с комплексными элементами, поэтому, не теряя общности, далее всюду будем считать все элементы С (I.4) вещественными.
- 2) Ограничения $\{p_n \neq 0, r_n \neq 0\}_{n=2}^m$, а также отличие от нуля всех верхних угловых главных миноров в дальнейшем нами будут сняты.
- 3) Здесь и далее под корректностью понимается возможность осуществления до конца (без срывов) вычислительного процесса и его устойчивость.
- 4) Условия $\left\{ \left| \frac{p_i^{(k)}}{r_{i+1}^{(k)}} \right| < 1 \right\}_{i=2}^m, k=2, 3, \dots$, как видно, связаны лишь с итерационным процессом (2.2) и не касаются исходной матрицы С (I.4).
- 5) $\varepsilon = \begin{cases} 0 & \text{— для теоретических расчетов,} \\ \text{константа, задаваемая разрядной сеткой ЭВМ в практических} \\ \text{вычислениях для представления минимального числа.} \end{cases}$

где $q_{m+1}^{(k)} = 0, p_{m+1}^{(k)} = 0 = r_{m+1}$, а $\{q_i = q_i, p_n = p_n, r_n = z_n\}_{i=1, n=2}^m$ – элементы исходной матрицы (I.4).

Если $\left| \frac{p_i^{(k)}}{r_{i+1}^{(k)}} \right| \leq \varepsilon$ в любой итерации $k = k^* \geq 2$, для некоторого $i = i^*$,

то
$$\left\{ p_n = 0; q_n = q_n; r_n = 0; \Lambda_{n+1} = 1; \lambda_n = q_n \right\}_{n=i^*}^m \quad (2.3)^I$$

для всех $k \geq k^*$. Тогда $\{\lambda_i\}_{i=1}^m$ определяются с абсолютной погрешностью²⁾ не хуже, чем $|\Delta \lambda_i| \leq M \cdot \varepsilon$, где $M = \max_i(z_i) / \min_i(\lambda_i)$.

Доказательство теоремы начнем с приведения результатов, которые имеют самостоятельное значение и которые мы сформулируем ниже в виде леммы.

Лемма I. Если С (I.4) – трехдиагональная матрица с ненулевыми элементами и отличными от нуля верхними главными угловыми минорами, то элементы матриц $\overset{(k)}{R}$ и $\overset{(k)}{L}$ в методе Бауэра [20] (I.I0), (I.II) однозначно определяются элементами матрицы $\overset{(k)}{C}$.

Доказательство леммы I осуществляется методом полной математической индукции. С целью экономии места мы опускаем все шаги этого доказательства за исключением последнего. Итак, пусть утверждение леммы верно для k -итерации в методе Бауэра, т.е.

$$\overset{(k)}{C} = \overset{(k)}{L} \cdot \overset{(k)}{R} \longrightarrow \overset{(k)}{C} = \overset{(k)}{R} \cdot \overset{(k)}{L}; \quad k=1, 2, \dots \quad (2.4)$$

Нетрудно далее проверить, что оно также верно для $k+1$ -итерации

$$\overset{(k)}{C} = \overset{(k)}{L} \cdot \overset{(k)}{R} \longrightarrow \overset{(k+1)}{C} = \overset{(k+1)}{R} \cdot \overset{(k+1)}{L}, \quad (2.5)$$

где элементы матриц $\overset{(k+1)}{L}$ и $\overset{(k+1)}{R}$ связаны с элементами матрицы $\overset{(k)}{C}$ следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} z_{i, i+1}^{(k+1)} &= z_{i+1}^{(k)} (\equiv z_{i+1}); i=1, 2, \dots, m-1, \\ z_{i, j}^{(k+1)} &= 0; i+2 \leq j \leq m, \\ z_{i, i}^{(k+1)} &= q_i - \frac{p_{i+1}}{q_i} \cdot \frac{z_{i+1}^{(k+1)}}{q_i} (\equiv z_i); z_{0, 1}^{(k+1)} = 0; i=1, 2, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (2.6)$$

- 1) **Замечание I.** Доказательство равенств (2.3), которые можно условно называть принципом последовательной итеративной фиксации, следует из леммы 6, которая будет нами доказана в этой же работе (но в силу соображений хронологической техники) лишь в теореме 2.
- 2) **Замечание 2.** Это ограничение (по точности!) следует, как видим, из условия теоремы о невырожденности матрицы С (I.4). Поэтому теореме I (как и все другие теоремы настоящей работы) не следует использовать в случае работы на ЭВМ, когда $|\min_i(\lambda_i)| \ll \varepsilon$. Указанное ограничение будет снято в следующей работе, где мы также сформулируем теорему без требования отличия от нуля всех остальных верхних главных миноров.

$$\left. \begin{aligned} z_{jj}^{(k+1)} &= 1; \quad j=1, 2, \dots, m, \\ z_{j+1,j}^{(k+1)} &= p_{j+1}^{(k)} / z_{jj}^{(k+1)}; \quad j=1, 2, \dots, m-1, \\ z_{i,j}^{(k+1)} &= 0; \quad j+2 \leq i \leq m, \end{aligned} \right\} \quad (2.7)$$

если выполняются условия $\{z_{ii}^{(k)} \neq 0\}_{i=1}^m$, где $\{q_1, q_i, p_i, z_i\}_{i=2}^m$ - элементы матрицы C , а $\{z_{ii}^{(k)}, z_{n-1,n}^{(k)}\}_{i=1, n=2}^m$ - элементы матрицы R и $\{z_{ij}^{(k)}, z_{n,n-1}^{(k)}\}_{j=1, n=2}^m$ - элементы матрицы L . Лемма доказана.

Лемма 2. Если матрица C (1.4) является трехдиагональной матрицей, все элементы которой отличны от нуля, а также имеет отличные от нуля все главные верхние угловые миноры, то все матрицы $C^{(k)}$ в методе (2.4), (2.5) Бауэра [20] являются трехдиагональными.

Доказательство леммы 2 непосредственно следует из леммы 1, поэтому мы на нем не останавливаемся.

Далее при доказательстве теоремы 1 воспользуемся леммами 1 и 2. Если учесть (1.14) (при условиях $\{\Delta_i^{(k)} \neq 0\}$)

$$z_{ii}^{(k+1)} = \Delta_i^{(k)} / \Delta_i^{(k-1)}, \quad (2.8)$$

а также (1.5)

$$\Delta_i^{(k)} = \prod_{n=1}^i q_n^{(k)} \prod_{n=1}^{i-1} \lambda_n^{(k)}, \quad (2.9)$$

где $\Delta_i^{(k)}$ - главные верхние угловые миноры матрицы $C^{(k)}$, $q_i^{(k)}$ - диагональные элементы матрицы $C^{(k)}$, а

$$\left. \begin{aligned} \lambda_{i+1}^{(k)} &= 1 - \gamma_i^{(k)} \lambda_i^{(k)}; \quad \lambda_i^{(k)} = \lambda_{i-1}^{(k)} - 1; \quad i=2, 3, \dots, m, \\ \gamma_i^{(k)} &= (p_i^{(k)} z_i^{(k)}) / (q_{i-1}^{(k)} q_i^{(k)}); \quad \gamma_1^{(k)} = \gamma_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i=2, 3, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

то, воспользовавшись (2.6) и (2.7), имеем

$$\left. \begin{aligned} z_{ii}^{(k+1)} &= q_i^{(k)} \lambda_{i+1}^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m, \\ z_{i,i+1}^{(k+1)} &= z_{i,i+1}^{(k)} (\equiv z_{i+1,i}^{(k)}); \quad i=1, 2, \dots, m-1, \\ z_{i,j}^{(k+1)} &= 0; \quad i+2 \leq j \leq m, \end{aligned} \right\} \quad (2.11)$$

$$\left. \begin{aligned} z_{jj}^{(k+1)} &= 1; \quad j=1, 2, \dots, m, \\ z_{j+1,j}^{(k+1)} &= p_{j+1}^{(k)} / (q_j^{(k)} \lambda_{j+1}^{(k)}); \quad j=1, 2, \dots, m-1, \\ z_{i,j}^{(k+1)} &= 0; \quad j+2 \leq i \leq m, \end{aligned} \right\} \quad (2.12)$$

Из леммы 2 следует, что матрица $C = R \cdot L$ является трехдиагональной. Если теперь воспользоваться элементами двухдиагональных матриц R и L в виде (2.11) и (2.12) и выполнить перемножения, то элементы матрицы $C = R \cdot L$ будут иметь вид

$$\left. \begin{aligned} q_i^{(k+1)} &= q_i^{(k)} \lambda_{i+1}^{(k)} + \frac{p_{i+1}^{(k)} z_{i,i+1}^{(k)}}{z_{i,i+1}^{(k)}}; \quad p_{m+1}^{(k)} = 0 = z_{m+1,m}^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m, \\ p_i^{(k+1)} &= \frac{q_i^{(k)} p_i^{(k)}}{z_{i,i}^{(k)}} \cdot \frac{\lambda_{i+1}^{(k)}}{\lambda_i^{(k)}}; \quad i=2, 3, \dots, m, \\ z_i^{(k+1)} &= z_i^{(k)} (\equiv z_i^{(k)}); \quad i=2, 3, \dots, m \end{aligned} \right\} \quad (2.13)$$

^{x)} Справедливость этих условий нами будет установлена (при условиях леммы 1) далее.

где $\{\lambda_i^{(k)}\}_{i=1}^{m+1}$ есть (2.10)₁ и $k=1, 2, \dots$.

Если теперь в (2.13) снова воспользоваться (2.10)₁, то получаем

$$\left. \begin{aligned} q_i^{(k+1)} &= q_i^{(k)} \lambda_{i+1}^{(k)} + q_{i+1}^{(k)} (1 - \lambda_{i+2}^{(k)}); \quad q_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i=1, 2, \dots, m, \\ p_i^{(k+1)} &= \frac{q_i^{(k)}}{z_{i,i}^{(k)}} \lambda_{i+1}^{(k)} (1 - \lambda_{i+2}^{(k)}); \quad i=2, 3, \dots, m, \\ z_i^{(k+1)} &= z_i^{(k)} (\equiv z_i^{(k)}); \quad i=2, 3, \dots, m; \quad k=1, 2, \dots \end{aligned} \right\} \quad (2.14)$$

С другой стороны, в методе Бауэра показано, что если номер итерации k достаточно большой, то имеют место приближенные равенства

$$\lambda_i \approx z_{ii}^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m. \quad (2.15)$$

Следовательно, из (2.11)₁ получаем, что

$$\lambda_i^{(k)} = q_i^{(k)} \lambda_{i+1}^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m; \quad k=1, 2, \dots \quad (2.16)$$

Из (2.15) также следует, что

$$\{z_{ii}^{(k)} \neq 0\}_{i=1}^m, \quad (2.17)$$

так как $\{\lambda_i \neq 0\}_{i=1}^m$ в силу невырожденности матрицы C (1.4).

Продолжая доказательство теоремы 1, сформулируем следующий результат в виде:

Лемма 3. Для последовательностей $\{\lambda_i^{(k)}\}_{i=1}^{m+1}$ и $\{\gamma_i^{(k)}\}_{i=2}^m$, определяемых в виде (2.10) через элементы матрицы $C^{(k)}$, справедливы следующие предельные соотношения:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{p_i^{(k)}}{q_i^{(k)}} = 0, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_{i+1}^{(k)} - 1 = 0, \quad i=2, 3, \dots, m. \quad (2.18)$$

При этом неравенства

$$\left| \frac{p_i^{(k)}}{q_i^{(k)}} \right| < 1; \quad i=2, 3, \dots, m \quad \text{для любого } k=1, 2, \dots \quad (2.19)$$

являются достаточными условиями для устойчивого вычисления последовательностей $\{\lambda_i^{(k)}\}$ (2.10)₁, $\{q_i^{(k+1)}\}$ и $\{p_i^{(k+1)}\}$ (2.13)+(2.14).

Доказательство. Из доказательства сходимости метода Бауэра [20] следует, что

$$\lim_{k \rightarrow \infty} p_i^{(k)} = 0; \quad i=2, 3, \dots, m. \quad (2.20)$$

Поэтому, учитывая, что $q_i^{(k)}$, $\lambda_{i+1}^{(k)}$ и $p_i^{(k)}$ связаны соотношением (2.14), а также, что $q_i^{(k)} \neq 0$ в силу (2.16) и условий теоремы $\{\lambda_i \neq 0\}$ и $\{z_i \neq 0\}$, получаем (2.18)₂. Аналогично, учитывая (2.20) и определение последовательности $\{\gamma_i^{(k)}\}$, получаем (2.18)₁. Далее, если обозначить $\Delta \lambda_i^{(k)}$ - абсолютную погрешность для $\lambda_i^{(k)}$, а также $\Delta \gamma_i^{(k)}$ - для $\gamma_i^{(k)}$ и воспользоваться линейным приближением теории ошибок с учетом зависимости $\lambda_{i+1}^{(k)} = f(\lambda_i^{(k)}, \gamma_i^{(k)})$, то получаем неравенства

$$\left\{ \left| \Delta \lambda_{i+1}^{(k)} \right| \leq \left| \frac{p_i^{(k)}}{q_i^{(k)}} \right| \left(\left| \frac{\Delta \lambda_i^{(k)}}{\lambda_i^{(k)}} \right| + \left| \frac{\Delta \gamma_i^{(k)}}{\gamma_i^{(k)}} \right| \right) \right\}_{i=2}^m, \quad (2.21)$$

для любого $k=1, 2, \dots$.

Откуда следует, что условия (2.19) являются достаточными для устойчивого вычисления последовательности $\{\Lambda_i^{(k)}\}_{i=1}^{m+1}$, $k=1,2,\dots$. Указанные достаточные условия, в силу (2.18), выполняются при $k \rightarrow \infty$, если они выполняются при $k=1$. Покажем далее, что условия $\left\{ \left| \frac{q_i^{(k)}}{\Lambda_i^{(k)}} \right| < 1 \right\}_{i=2}^m, k=1,2,\dots$ являются также достаточными для устойчивого вычисления $\{q_i^{(k)}\}$ и $\{p_i^{(k)}\}$ в (2.14) при $k \rightarrow \infty$, учитывая, что $\tau_i^{(k)} = \tau_i^{(k)} (\equiv \tau_i)$. Действительно, из (2.13) следует, что

$$\left. \begin{aligned} \Delta q_i^{(k+1)} & \equiv (q_i^{(k+1)} - q_i^{(k)}) = q_i^{(k)} \left(\frac{q_{i+1}^{(k)}}{q_i^{(k)}} \cdot \frac{y_{i+1}^{(k)}}{\Lambda_{i+1}^{(k)}} - \frac{y_i^{(k)}}{\Lambda_i^{(k)}} \right), \\ \Delta p_i^{(k+1)} & \equiv (p_i^{(k+1)} - p_i^{(k)}) = \frac{1}{\tau_i^{(k)}} \left(q_i^{(k+1)} \Lambda_{i+1}^{(k+1)} \frac{y_i^{(k+1)}}{\Lambda_i^{(k+1)}} - q_i^{(k)} \Lambda_{i+1}^{(k)} \frac{y_i^{(k)}}{\Lambda_i^{(k)}} \right). \end{aligned} \right\} (2.22)$$

Откуда следует, что

$$\left. \begin{aligned} \left| \frac{\Delta q_i^{(k+1)}}{q_i^{(k+1)}} \right| & \leq \left[\left| \frac{y_i^{(k)}}{\Lambda_i^{(k)}} \right| + \left| \frac{q_{i+1}^{(k)}}{q_i^{(k)}} \right| \cdot \left| \frac{y_{i+1}^{(k)}}{\Lambda_{i+1}^{(k)}} \right| \right] \xrightarrow{(2.18), (2.19)} 0 \rightarrow \left| \Delta q_i^{(k)} \right| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0 \\ \left| \Delta p_i^{(k+1)} \right| & = \left| \frac{q_i^{(k+1)}}{\tau_i^{(k)}} \left(1 - \frac{y_i^{(k+1)}}{\Lambda_i^{(k+1)}} \right) - \frac{q_i^{(k)}}{\tau_i^{(k)}} \left(1 - \frac{y_i^{(k)}}{\Lambda_i^{(k)}} \right) \right| \xrightarrow{(2.18), (2.19)} 0 \end{aligned} \right\} (2.23)$$

Т.е. если выполняются условия (2.19), то $|\Delta q_i^{(k+1)}|$ и $|\Delta p_i^{(k+1)}|$ сверху ограничены и убывают при $k \rightarrow \infty$. Лемма 3 доказана. Вместе с тем мы закончили доказательство теоремы I. Из процедуры доказательства теоремы I имеем

Следствие I. В методе Бауэра [20], если матрица A - трехдиагональная с ненулевыми элементами, все главные верхние угловые миноры которой отличны от нуля, то матрица $L^{(k)}$ стремится (при $k \rightarrow \infty$) к единичной матрице, а матрица $C^{(k)}$ стремится к верхней двухдиагональной с собственными значениями исходной матрицы C (I.4) на ее главной диагонали.

3. Компактные модификации метода Бауэра для трехдиагональных матриц

В настоящем разделе мы выполним ряд модификаций теоремы I с целью оптимизации вычислений $\{\lambda_i^{(k)}\}_{i=1}^m$.

Теорема I'. Для любой трехдиагональной матрицы с ненулевыми элементами, все верхние главные угловые миноры которой отличны от нуля, ее собственные значения могут быть найдены корректно при^{I)}

I) Замечание 3. Ограничения $\{\tau_i^{(k)} < 1\}_{i=1}^m, k=2,3,\dots$, настоящей теоремы, как видим, полностью эквивалентны ограничениям 2) предыдущей теоремы I, и касаются только итерационного процесса (3.2), точнее, итерационной процедуры (3.2)₂ вычисления $\{q_i^{(k)}\}$. При этом указанные ограничения не относятся, как следует из (3.1), к $\{\tau_i^{(k)} \rightarrow \lambda_i^{(k)}\}$, характеризующим C (I.4).

$\{\tau_i^{(k)} < 1\}_{i=2}^m, k=1,2,\dots$ в виде:

Если $|\rho_i^{(k)}| > \varepsilon$ для любых $k=1,2,\dots$, то

$$\left. \begin{aligned} \tau_i^{(k)} & = \frac{p_i^{(k)}}{q_i^{(k)}} \cdot \frac{y_i^{(k)}}{q_{i-1}^{(k)}}; \quad y_i^{(k)} = y_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i=2,3,\dots,m, \\ \tau_i^{(k)} & = \frac{q_i^{(k)}}{\Lambda_i^{(k)}}; \quad \tau_1^{(k)} = \tau_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i=2,3,\dots,m, \\ \Lambda_{i+1}^{(k)} & = 1 - \tau_i^{(k)}; \quad \Lambda_1 = \Lambda_2 = 1; \quad i=2,3,\dots,m, \\ \lambda_i^{(k)} & = q_i^{(k)} (1 - \tau_i^{(k)}); \quad i=1,2,\dots,m, \\ \lambda_i & = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_i^{(k)}; \quad i=1,2,\dots,m, \end{aligned} \right\} (3.1)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_i^{(k+1)} & = \frac{q_i^{(k+1)}}{\tau_i^{(k)}} (1 - \tau_i^{(k)}) \tau_i^{(k)}; \quad i=2,3,\dots,m, \\ q_i^{(k+1)} & = q_i^{(k)} (1 - \tau_i^{(k)}) + q_{i+1}^{(k)} \tau_{i+1}^{(k)}; \quad q_{m+1} = 0; \quad i=1,2,\dots,m \end{aligned} \right\} (3.2)$$

Если $|\rho_i^{(k)}| \leq \varepsilon$ в любой итерации $k = k^* \geq 2$, для некоторого $i = i^*$, то

$$\left\{ \begin{aligned} p_n^{(k^*)} & = 0; \quad q_n = q_n; \quad y_n = 0; \quad \tau_n = 0; \quad \Lambda_{n+1} = 1; \quad \lambda_n = q_n \end{aligned} \right\}_{n=i^*}^m (3.3)$$

для всех $k \geq k^*$ и $\{\lambda_i^{(k)}\}_{i=1}^m$ определяются с абсолютной погрешностью не хуже, чем $|\Delta \lambda_i| \leq M \cdot \varepsilon$, где $M = \max(\tau_i) / \min(\lambda_i)$.

Доказательство теоремы непосредственно следует из теоремы I, если воспользоваться введенными выше обозначениями для $\tau_i^{(k)}$, а также определением $\lambda_i^{(k)}$ (2.1)₂. Поэтому мы на нем не останавливаемся.

Сформулируем далее следующий результат.

Лемма 4. Пусть $B^{(k)}$ - итерационная матрица типа I) матрицы $C^{(k)}$ в методе Бауэра для любой трехдиагональной матрицы B типа C (I.4). Пусть также все элементы матрицы B отличны от нуля. Тогда

$$\lambda_n^{(k)} = 0 \quad (1 \leq n \leq i-1) \quad (3.4)$$

являются необходимыми и достаточными, а

$$\lambda_i^{(k)} = 0 \rightarrow \left[\Lambda_{i-1}^{(k)} = y_{i-1}^{(k)}, \Lambda_{i+2}^{(k)} = 1, \Lambda_{i+1}^{(k)} = \infty, \Lambda_i^{(k)} \cdot \Lambda_{i+1}^{(k)} \equiv -y_i^{(k)} \right] \quad \text{и} \quad (3.5)$$

$$\tau_i^{(k)} = -\infty \rightarrow \left[\tau_{i-1}^{(k)} = 1, \tau_{i+2}^{(k)} = y_{i+2}^{(k)}, \tau_{i+1}^{(k)} = 0, \tau_i^{(k)} \cdot \tau_{i+1}^{(k)} \equiv -y_{i+1}^{(k)} \right] \quad (3.6)$$

являются достаточными (при любом i из интервала $1 \leq i \leq m$) условиями для сингулярности (\equiv равенство нулю) $(i-1)$ -го верхнего главного углового минора матрицы $C^{(k)}$ при любом $k=1,2,\dots$.

Доказательство. Как следует из леммы 2 (доказанной выше), матрицы $C^{(k)}$ (для любого k) в методе Бауэра являются трехдиагональными. При этом в соответствии с теоремой I2 [4] будут иметь место соотношения

I) Чтобы не вводить новых обозначений для элементов матриц B и $B^{(k)}$, мы пользуемся для них формально обозначениями элементов для C и $C^{(k)}$.

$$(I.5)_I) \quad \Delta_1^{(k) i-1} = \prod_{n=1}^{i-1} q_n^{(k)} \prod_{n=1}^i \lambda_n^{(k)}, \quad (3.7)$$

устанавливающие связь между верхними главными угловыми минорами $\Delta_1^{(k) i-1}$ и элементами последовательности $\{\lambda_n^{(k)}\}$. Из этого соотношения, если $\{q_n \neq 0\}_{n=1}^{i-1}$ при любых k , следует достаточное условие (3.5), если учесть (I.8). Для доказательства условия (3.4) воспользуемся в (3.7) выражением $q_n^{(k)}$ через $\lambda_n^{(k)}$ и $\lambda_{n+1}^{(k)}$ из (2.1)₃). Имеем

$$\Delta_1^{(k) i-1} = \prod_{n=1}^{i-1} \frac{\lambda_n^{(k)}}{\lambda_{n+1}^{(k)}} \prod_{n=1}^i \lambda_n^{(k)} = \prod_{n=1}^{i-1} \lambda_n^{(k)}. \quad (3.8)$$

Из (3.8) следует, что если любое из $\{\lambda_n = 0\}$ при $1 \leq n \leq i-1$, то $\prod_{n=1}^{i-1} \lambda_n^{(k)} = 0$. Следовательно, условие $\lambda_n = 0$ является достаточным для $\Delta_1^{(k) i-1} = 0$. Пусть теперь $\{\lambda_n \neq 0\}$ для всех $1 \leq n \leq i-1$, но $\Delta_1^{(k) i-1} = 0$. Тогда в силу (3.8) получаем противоречие $0 = (\neq 0)$, что доказывает справедливость необходимости условия $\{\lambda_n = 0\}$ при любом $1 \leq n \leq i-1$ для выполнения равенства $\Delta_1^{(k) i-1} = 0$. Итэк, условия (3.4) являются необходимыми и достаточными.

Пусть теперь $\lambda_i = 0$. Тогда из (I.7) следует, что

$$\lambda_{i-1}^{(k)} = \delta_{i-1}^{(k)}, \lambda_{i+2}^{(k)} = 1, \lambda_{i+1}^{(k)} = \infty, \quad \lambda_i \cdot \lambda_{i+1} = -\delta_i^{(k)}, \quad (3.9)$$

и тоже из определения последовательности $\{\tau_i\}_{i=1}^m$ (3.1)₂ следует, что

$$\tau_{i-1}^{(k)} = 1, \tau_{i+2}^{(k)} = \delta_{i+2}^{(k)} \quad \text{и} \quad \tau_{i+1}^{(k)} = 0, \quad (3.10)$$

т.е. если $\lambda_i = 0$, то $\tau_i^{(k)} = -\infty$. Следовательно, условие $\tau_i^{(k)} = -\infty$ является достаточным (при любом i из интервала $2 \leq i \leq m$) для сингулярности $(i-1)$ -верхнего главного углового минора матрицы $C^{(k)}$ при любом $k=1, 2, \dots$. Лемма доказана.

Замечание 4. Справедливость выполнения теоретических условий $\{(\Delta_1^{(k) i} \neq 0) \rightarrow (\Delta_1^{(k+1) i} \neq 0)\}_{i=1}^m, k=2, 3, \dots$ может быть нарушена из-за вычислительных погрешностей на ЭВМ. Тогда результат леммы 4 позволяет корректно продолжить вычисления по алгоритму теорем I (I'), положив $\infty = \frac{1}{\varepsilon}$.

Теорема 2. Собственные значения любой I трехдиагональной матрицы C (I.4), все главные верхние угловые миноры которой отличны от нуля, могут быть найдены корректно с использованием одного из следующих вы-

I) Несмотря на то, что все методы этой теоремы получены на основе теорем I (I'), тем не менее в каждом из них имеется лишь свое требование на элементы исходной матрицы C (I.4). Кроме того, T-метод обладает самой высокой степенью устойчивости по сравнению со всеми другими методами этой теоремы.

числительных процессов:

Метод 2 (T-метод) - для матриц C (I.4), у которых $\{z_i \neq 0, q_1 \neq 0, q_i \neq 0\}_{i=2}^m$.

$$\text{Если } |\tau_i^{(k)}| > \varepsilon \text{ для любых } k=1, 2, \dots, \text{ то} \\ \tau_i^{(k)} = \frac{p_i^{(k)}}{q_i^{(k)}} \cdot \frac{z_i}{q_i^{(k)}}; \quad \tau_1^{(k)} = \tau_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i=2, 3, \dots, m, \\ \tau_i^{(k)} = \frac{q_i^{(k)}}{1 - \tau_{i-1}^{(k)}}; \quad \tau_1^{(k)} = \tau_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i=2, 3, \dots, m, \quad (3.11)$$

$$p_i^{(k)} = \frac{q_i^{(k)}}{\tau_i^{(k)}} (1 - \tau_i^{(k)}) \tau_i^{(k)}; \quad i=2, 3, \dots, m, \quad (3.12)$$

$$q_i^{(k)} = q_i (1 - \tau_i^{(k)}) + q_{i+1}^{(k)} \tau_{i+1}^{(k)}; \quad q_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.13)$$

$$\lambda_i = \lim_{k \rightarrow \infty} q_i^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m.$$

Если $|\tau_i^{(k)}| \leq \varepsilon$ в любой итерации $k = k^* + 2$ для некоторого $i = i^*$, то

$$\{p_n = 0; q_n = q_n; \delta_n = 0; \tau_n = 0; \lambda_n = q_n\}_{n=i^*}^m, \text{ для всех } k > k^*. \quad (3.14)$$

Метод 3 (T-метод) - для матриц C (I.4), у которых только $q_1 \neq 0$.

$$\text{Если } |\tau_i^{(k)}| > \varepsilon \text{ для любых } k=1, 2, \dots, \text{ то} \\ \tau_i^{(k)} = \left[\frac{\lambda_i^{(k)}}{\lambda_{i-1}^{(k)}} \right] \tau_i^{(k)} = \lambda_i \left(\frac{\tau_i^{(k)}}{\lambda_{i-1}^{(k)}} \right); \quad i=2, 3, \dots, m, \\ \lambda_i = (\lambda_i + \tau_{i+1}^{(k)}) - \tau_i^{(k)}; \quad \tau_1^{(k)} = 0 = \tau_{m+1}^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m \\ \lambda_i = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_i^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.15)$$

Если $|\tau_i^{(k)}| \leq \varepsilon$ в любой итерации $k = k^* + 2$, для некоторого $i = i^*$, то

$$\{\tau_n = 0; \lambda_n = \lambda_n\}_{n=i^*}^m, \text{ для всех } k > k^*, \text{ где} \quad (3.16)$$

$$\tau_i^{(k)} = \frac{p_i^{(k)}}{q_i^{(k)}} \cdot \frac{z_i}{q_i^{(k)}}; \quad \tau_1^{(k)} = \tau_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i=2, 3, \dots, m, \\ \lambda_i = q_i - \tau_i^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.17)$$

Метод 4 ((T-λ)-метод) - для матриц C (I.4), у которых только $q_1 \neq 0$.

$$\text{Если } |\tau_i^{(k)}| > \varepsilon \text{ для любых } k=1, 2, \dots, \text{ то} \\ \tau_i^{(k)} = \frac{p_i^{(k)}}{q_i^{(k)}} \cdot \frac{z_i}{q_i^{(k)}} \left[\frac{p_i^{(k)}}{q_i^{(k)}} z_i \right]; \quad \tau_1^{(k)} = \tau_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i=2, 3, \dots, m, \\ \lambda_i = q_i - \tau_i^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m, \quad (3.18)$$

$$p_i^{(k)} = \left[\frac{\lambda_i^{(k)}}{\lambda_{i-1}^{(k)}} \right] p_i^{(k)} = \left(\frac{p_i^{(k)}}{\lambda_{i-1}^{(k)}} \right) \lambda_i; \quad i=2, 3, \dots, m, \\ q_i^{(k)} = (\lambda_i + q_{i+1}^{(k)}) - \lambda_{i+1}^{(k)}; \quad q_{m+1}^{(k)} = 0 = \lambda_{m+1}^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m, \\ \lambda_i = \lim_{k \rightarrow \infty} q_i^{(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} p_i^{(k)}; \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3.19)$$

Если $|\tau_i^{(k)}| \leq \varepsilon$ в любой итерации $k = k^* + 2$ для некоторого $i = i^*$, то

$$\{p_n = 0; q_n = q_n; \lambda_n = \lambda_n\}_{n=i^*}^m \text{ для всех } k > k^*. \quad (3.20)$$

Метод 5 (λ -метод) - для матриц C (I.4), у которых только $q_i \neq 0$.

Если $|\rho_i^{(k)}| > \varepsilon$ для любых $k=1, 2, \dots$, то

$$\begin{aligned} \lambda_i^{(k)} &= q_i - \frac{\rho_i^{(k)}}{\lambda_i^{(k-1)}} z_i; & \lambda_1^{(k)} &= q_1; & i &= 2, 3, \dots, m, \\ \rho_i^{(k)} &= \left(\frac{\rho_i^{(k-1)}}{\lambda_i^{(k-1)}} \right) \lambda_i^{(k-1)}; & i &= 2, 3, \dots, m, \\ q_i^{(k)} &= \left(\frac{\lambda_i^{(k-1)}}{\lambda_i^{(k)}} + q_{i+1}^{(k)} \right) - \lambda_{i+1}^{(k)}; & q_{m+1}^{(k)} &= 0 = \lambda_{m+1}^{(k)}; & i &= 1, 2, \dots, m, \\ \lambda_i &= \lim_{k \rightarrow \infty} q_i^{(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_i^{(k)}; & i &= 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Если $|\rho_i^{(k)}| \leq \varepsilon$ в любой итерации $k = k^* + 1$ для некоторого $i = i^*$,

то

$$\left\{ \lambda_n^{(k)} = q_n; \rho_n^{(k)} = 0, q_n = \lambda_n \right\}_{n=i^*}^m \quad \text{для всех } k > k^*. \quad (3.22)$$

При этом собственные значения в τ - и λ -методах имеют абсолютную погрешность $\{|\Delta \lambda_i| \leq M \varepsilon\}_{i=1}^m$, а в τ - и $(\tau-\lambda)$ -методах $\{|\Delta \lambda_i| \leq m \varepsilon\}_{i=1}^m$. Здесь во всех методах (т.е. $\tau, \tau, (\tau-\lambda)$ - и λ -методах) $\{ \rho_i^{(k)}, z_i, q_i, \lambda_i \}_{i=2}^m$ - элементы исходной матрицы C (I.4).

Доказательство теоремы начнем с установления справедливости метода 2 (τ -метод). Процесс (3.I2), (3.II) и (3.I4), как видим, следует непосредственно из (3.I), (3.2) и (3.3) теоремы I'. С другой стороны, из леммы 3 и (3.I)₂ получаем

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \rho_i^{(k)} = 0, \quad i = 2, 3, \dots, m, \quad (3.23)$$

поэтому из (3.I)₁ и (3.23) следует (3.I3). Далее докажем следующий результат, который устанавливает свойство последовательности $\{\rho_i^{(k)}\}$.

Лемма 5. Если $\{\rho_n^{(k)}\}$ - элементы последовательности (3.II)₂, то равенство

$$\rho_n^{(k)} = 1 \quad (3.24)$$

является при любых n из интервала $1 \leq n \leq m$ и $k=1, 2, \dots$ достаточным условием для обращения в нуль n -го верхнего главного углового минора итерационной матрицы $C^{(k)}$ (в частности, исходной матрицы $C = C^{(0)}$).

Доказательство леммы 5 следует непосредственно из (3.6) леммы 4, поэтому не будем повторять его.

Теперь докажем справедливость (3.I5) и (3.I7) в τ -методе, (3.I8), (3.I9) в $(\tau-\lambda)$ -методе и (3.2I) в λ -методе. Из (3.II)₂, воспользовавшись определением $\{\rho_i^{(k)}\}$ (3.II)₁, получаем

$$\rho_{i+1}^{(k)} = \frac{\rho_{i+1}^{(k-1)} z_{i+1}}{q_i - \rho_i^{(k-1)}}; \quad \rho_{m+1}^{(k)} = 0; \quad i = 1, 2, \dots, m-1; \quad k = 1, 2, \dots, \quad (3.25)$$

где обозначим

$$\rho_i^{(k)} = q_i^{(k)} z_i; \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.26)$$

Подставив теперь (3.26) в (3.I2) и (3.I)₄, получаем следующие соотношения:

$$\left. \begin{aligned} q_i^{(k)} &= q_i - \rho_i^{(k)} + \rho_{i+1}^{(k)}; & i &= 1, 2, \dots, m, \\ \rho_i^{(k+1)} &= \frac{\rho_i^{(k)} - \rho_{i+1}^{(k)}}{z_i} \rho_i^{(k)}; & i &= 2, 3, \dots, m, \\ \rho_i^{(k)} &= q_i - \rho_i^{(k)}; & i &= 1, 2, \dots, m; \end{aligned} \right\} \quad \text{для всех } k=1, 2, \dots \quad (3.27)$$

Воспользовавшись в (3.27)₃ равенством (3.27)₁ и после этого еще раз (3.27)₃, получаем (3.I5)₂. Далее, воспользовавшись в (3.25) в $(k+1)$ -итерации равенствами (3.27)₂ и (3.27)₃ и в последнем снова (3.27)₃ и (3.I5)₂, получаем (3.I5)₁. Отметим, наконец, что имеет место (3.I5)₃ в соответствии с (3.I)₅). Итэк, доказали справедливость (3.I5) и (3.I7). Для доказательства $(\tau-\lambda)$ - и λ -методов в (3.27)₂ и (3.25) (для i) воспользуемся (3.27)₃. В результате получаем для $\rho_i^{(k)}$ и $\rho_{i+1}^{(k)}$

$$\left. \begin{aligned} \rho_i^{(k+1)} &= \frac{\rho_i^{(k)}}{z_i} \rho_i^{(k)}; & i &= 2, 3, \dots, m, \\ \rho_i^{(k)} &= \frac{\rho_i^{(k-1)}}{\lambda_{i-1}^{(k-1)}} z_i; & i &= 2, 3, \dots, m, \end{aligned} \right\} \quad \text{для всех } k=1, 2, \dots \quad (3.28)$$

Теперь из (3.28)₁, воспользовавшись (3.28)₂, получаем (3.I9)₁. Если далее в (3.27)₁ вместо $q_i^{(k)}$ и $\rho_{i+1}^{(k)}$ воспользоваться их выражениями из (3.27)₃, то приходим к (3.I9)₂. Равенства (3.I8) взяты из (3.25) и (3.27), а (3.I9)₃ получаем из (3.I5)₃ и (3.I3). Равенства (3.2I)₂, (3.2I)₃ и (3.2I)₄ следуют непосредственно из (3.I9), а (3.2I)₁ - получаем из (3.I8); если в представлении (3.I8)₂ для $\rho_i^{(k)}$ воспользоваться правым представлением (3.I8)₁ для $\rho_i^{(k)}$, а после этого опять (3.I8)₂ для $\lambda_{i-1}^{(k)}$. Итэк, справедливость всех представлений (итерационных процессов) для $\tau, \tau, (\tau-\lambda), \lambda$ -методов, кроме (3.I4), (3.I6), (3.20) и (3.22), установлена. Для доказательства справедливости последних воспользуемся леммами 4 и 5, а также следующим результатом.

Лемма 6. Если для любого i из интервала $2 \leq i \leq m$ имеет место предельное соотношение

$$\left| \frac{\rho_i^{(k)}}{\lambda_{i-1}^{(k-1)}} z_i \right| \longrightarrow 0 \quad \text{при } k \rightarrow \infty, \quad (3.29)$$

то справедливы также предельные соотношения

$$\left\{ \left| \frac{\rho_n^{(k)}}{\lambda_{n-1}^{(k-1)}} z_n \right| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0 \right\} \xrightarrow{\lambda_{n-1} \neq 0} \left\{ \left| \rho_n^{(k)} \right| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0 \right\}_{n=i}^m \quad (3.30)$$

Доказательство. Из (3.2I)₁ получаем

$$\lambda_i^{(k)} = q_i - \frac{\rho_i^{(k)}}{\lambda_{i-1}^{(k-1)}} z_i; \quad \lambda_{i+1}^{(k)} = q_{i+1} - \frac{\rho_{i+1}^{(k)}}{\lambda_i^{(k)}} z_{i+1} \rightarrow \lambda_i - \lambda_{i+1} = (q_i - q_{i+1}) + \frac{\rho_{i+1}^{(k)}}{\lambda_i} z_{i+1} - \frac{\rho_i^{(k)}}{\lambda_{i-1}} z_i. \quad (3.31)$$

Запишем теперь (3.2I)₃ в виде

$$q_i^{(k+1)} - q_{i+1}^{(k)} = \lambda_i^{(k)} - \lambda_{i+1}^{(k)}; \quad q_{m+1}^{(k)} = 0 = \lambda_{m+1}^{(k)}; \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad k = 1, 2, \dots \quad (3.32)$$

Сравнивая правое выражение в (3.32) и левое в (3.31), получаем

$$\frac{z_{i+1}}{\lambda_i} \rho_{i+1}^{(k)} = (q_i^{(k)} - \bar{q}_i) + \frac{z_i}{\lambda_i} \rho_i^{(k)}. \quad (3.33)$$

Дальнейшие рассуждения выполним в соответствии с методом полной математической индукции.

Пусть сначала в (3.33) при $i=m-1$ выполняется соотношение

$$\left| \frac{z_{m-1}}{\lambda_{m-1}} \rho_{m-1}^{(k)} \right| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0. \quad (3.34)$$

В соответствии с теоремой I для любого i имеет место $q_i \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \lambda_i$. Следовательно, и при $i=m$ имеем $q_m^{(k)} - \bar{q}_m \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$. Учитывая (3.34), (3.32) и последний предельный переход в (3.33), получаем

$$\left| \frac{z_m}{\lambda_{m-1}} \rho_m^{(k)} \right| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0. \quad (3.35)$$

Таким образом, показали, что (3.30) следует из (3.29) при $i=m-1$.

Пусть теперь в (3.33) $i=m-2$. Тогда, воспользовавшись такими же (как и выше) рассуждениями, получаем цепочку следствий

$$\left\{ \left| \frac{z_{m-2}}{\lambda_{m-3}} \rho_{m-2}^{(k)} \right| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0 \right\} \Rightarrow \left\{ \left| \frac{z_{m-1}}{\lambda_{m-2}} \rho_{m-1}^{(k)} \right| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0 \right\} \Rightarrow \left\{ \left| \frac{z_m}{\lambda_{m-1}} \rho_m^{(k)} \right| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0 \right\}.$$

Аналогично предыдущей цепочке выстраивается цепочка следствий для $i=m-3$, а также для последнего шага при $i=(m-n)-1$ методом полной математической индукции, если указанная цепочка верна для $i=m-n$ при любом n . Итак, левую часть в (3.30) доказали. Если $\{0 < |\lambda_{n-1}| < \dots < \lambda_n\}$, т.е. отличны от нуля и ограничены, то, учитывая ограниченность $\{|z_n| < \infty\}_{n=1}^m$, из левой части в (3.30) получаем правые предельные соотношения в (3.30). Если теперь $\{|\lambda_{n-1}| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0\}_{n=1}^m$, то из ограниченности $\{|z_n| < \infty\}_{n=1}^m$ и левых предельных соотношений следует, что $|\rho_n^{(k)}| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$ быстрее, чем $|\frac{z_n}{\lambda_{n-1}}|$. Итак, правую часть в (3.30) доказали. Нетрудно видеть, что из правой части (3.30) следует ее левая часть только для $\{\lambda_{n-1}^{(k)} \neq 0\}$. Лемма доказана.

Продолжаем теперь далее доказательство теоремы 2. Пусть $|\rho_{i^*}^{(k^*)}| \leq \varepsilon$ для $i=i^*$ и в некотором $k=k^*$. Тогда из (3.33) леммы 6 получаем в силу $(q_i = \bar{q}_i) \{|\rho_n^{(k)}| \leq M \cdot \varepsilon\}_{n=i^*}^m$, где $M = \max(\tau_i) / \min(\lambda_i)$, ε - константа, задаваемая разрядной сеткой ЭВМ, в практических вычислениях для представления минимального числа¹⁾. Поэтому соотношения (3.14) и (3.22) позволяют абсолютную погрешность $\Delta \lambda$ в этих методах сделать не более чем $M \cdot \varepsilon$. С другой стороны, из (3.18)₁ и (3.30) в лемме 6 тоже получаем, что если $|\rho_i^{(k)}| \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$, то $\{|\rho_n^{(k)}| \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0\}_{n=i}^m$. Следовательно, если $|\rho_{i^*}^{(k^*)}| \leq \varepsilon$ для $i=i^*$ и некотором $k=k^*$, то соотношения (3.16) и (3.20) устанавливаются с абсолютной погрешностью,

¹⁾ Итак, максимальная погрешность в соответствии с настоящей оценкой будет у минимального собственного значения.

которая не больше $m \varepsilon$. Итак, (3.14), (3.16), (3.20) и (3.22) доказаны. Теперь докажем, что последовательность $\{\tau_i\}_{i=2}^m$, задаваемая в виде (3.18)₁, определяется для любой трехдиагональной матрицы C (1.4), главные угловые верхние миноры и элемент q_1 которой отличны от нуля. Для этого воспользуемся следующими двумя результатами.

Лемма 7. Пусть $\tau_n^{(k)}$ (для любых $n=1, 2, \dots, m$) - элемент последовательности $\{\tau_i^{(k)}\}$ (3.18)₁. Тогда имеют место

I. Пределы

$$\left\{ \lim_{k \rightarrow \infty} \tau_n^{(k)} = 0 \right\}_{n=1}^m, \text{ а также} \quad (3.36)$$

2. Равенства

$$\left[\tau_n^{(k)} = q_n^{(k)} \right] \rightarrow \left[\tau_{n+1}^{(k)} = \infty, \tau_{n+2}^{(k)} = 0, \tau_{n+3}^{(k)} = \frac{\rho_{n+2}^{(k)} z_{n+2}}{q_{n+2}^{(k)}}, \tau_{n+1}^{(k)} \cdot \tau_{n+2}^{(k)} = -\frac{\rho_{n+2}^{(k)} z_{n+2}}{q_{n+2}^{(k)}} \right], \quad (3.37)$$

(для любого $n=1, 2, \dots, m$) являющиеся достаточными условиями для обращения в нуль n -го верхнего углового главного минора в итерационной матрице $C^{(k)}$ для любых $k=1, 2, \dots$.

Доказательство. Из (3.26), (3.1)₂, (3.13) и (3.23) получаем (3.36). Равенства (3.37) вытекают непосредственно из (3.6) и (3.26). Лемма доказана.

Лемма 8. Для любой трехдиагональной матрицы C (1.4), главные угловые верхние миноры и элемент q_1 которой отличны от нуля, последовательность $\{\tau_i^{(k)}\}$ (3.18)₁ всегда определена.

Доказательство леммы 8 следует из ее условий и леммы 7, поэтому, с целью экономии места, здесь опускается.

Продолжая далее доказательство теоремы 2, отметим следующее. Из леммы 8 получаем, что последовательность $\{\tau_i^{(k)}\}$ определяется для любой трехдиагональной матрицы, главные верхние угловые миноры и элемент q_1 которой отличны от нуля, поэтому алгоритмы (3.15)+(3.22), т.е. T -, $(T-\lambda)$ - и λ -методы, определены для любых i и при любых k . Остановимся далее на вопросе устойчивости T -, $(T-\lambda)$ - и λ -методов, используя лемму 7 и 8. С одной стороны, в (3.15) $\lambda_i^{(k)} \neq 0$ ($i=1, 2, \dots, m$), так как $\lambda_i \rightarrow \lambda_i (\neq 0)$ при $k \rightarrow \infty$. С другой стороны, в (3.17)₁ выполняются условия $\{\lambda_i \neq q_i\}_{i=1}^m$ в силу леммы 7 и условий теоремы 2.

Учитывая далее вид процесса (3.15)₁, а также указанный способ суммирования величин в (3.15)₂, убеждаемся, что $\tau_i^{(k)}$ (3.15) - устойчивый процесс при $|\frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}}| \leq 1$. Но из-за нерекуррентности процесса (3.15)₁ (по i) его устойчивость не нарушается и при $|\frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}}| > 1$ для некоторых i . То же самое можно сказать и о процессах (3.18)+(3.19), (3.21), учитывая в случае (3.21) лемму 6. Итак, показали, что приведенные выше процессы могут быть осуществлены устойчиво и без срывов до конца, т.е. являются корректными. Теорема 2 доказана.

Замечание 5. Как можно было обратить внимание при конструировании алгоритмов в обеих теоремах, а также при использовании принципа¹⁾ последовательной итеративной фиксации собственных значений, начиная с λ_m (по достижении ими максимальной точности (лемма 6)), мы не придавали особое значение коэффициентам $\{z_n\}_{n=2}^m$ исходной матрицы \tilde{C} (I.4). Это обусловлено стремлением сохранить в теоремах в явном виде всю информацию об элементах исходной матрицы. При численной же реализации всех построенных выше (за исключением T -метода) алгоритмов на ЭВМ можно (в случае $\{z_n = z \neq 0\}_{n=2}^m$) положить $\{\tilde{z}_n = 1\}_{n=2}^m$, выполнив предварительно преобразование подобия

$$\tilde{C} = \text{diag} [1, (z_i)_{i=2}^m] \cdot \tilde{C} \cdot \text{diag} [1, (z_i^{-1})_{i=2}^m]. \quad (3.38)$$

Если же некоторые из $z_n = 0$, то матрица \tilde{C} распадается на несколько подматриц. К этому случаю мы вернемся в следующих работах.

Замечание 6. Нам осталось остановиться на вопросе о скорости сходимости указанных вычислительных процессов. Отметим прежде всего, что все приведенные выше процессы обладают одинаковой скоростью сходимости. Поэтому общую формулу для оценки их скорости сходимости можно записать, исходя, например, из (3.21)₂) в виде

$$|\rho_i^{(k+1)}| = \prod_{n=2}^k \left| \frac{\lambda_i^{(n)}}{\lambda_{i-1}^{(n)}} \right| \cdot |\rho_i^{(1)}|; \quad \kappa = 1, 2, \dots; \quad i = 2, 3, \dots, m. \quad (3.39)$$

Откуда видим, что скорость сходимости определяется распределением собственных значений $\{\lambda_i\}_{i=2}^m$ матрицы C (I.4).

4. Заключение

В заключение настоящей работы прежде всего отметим, что ее объем не позволяет нам выполнить дальнейшие модификации полученных теорем с целью, во-первых, снятия ограничений на верхние главные угловые миноры исходной матрицы \tilde{C} (I.4) и, во-вторых, ускорения сходимости полученных алгоритмов. Эти вопросы будут нами рассмотрены в дальнейших публикациях. Здесь же в качестве основных результатов настоящей работы отметим следующие:

1. Выполнены на основе [4] модификации метода Бауэра (LR -алгоритма) для нахождения собственных значений трехдиагональных матриц, все верхние главные угловые миноры которых отличны от нуля.

2. Получены эффективные корректные A -, T -, T^{-1} - λ -методы (теоремы I,2) (отличные от известных ранее) для вычисления собственных значений $\{\lambda_i \neq 0\}_{i=2}^m$ трехдиагональных матриц указанного вида, а также получена явная простая формула для оценки скорости их сходимости.

¹⁾ По сути совпадающего с исчерпанием [1].

3. Найдены необходимые и достаточные условия обращения в нуль главных верхних угловых миноров как у самой матрицы \tilde{C} (I.4), так и у итерационных матриц $\tilde{C}^{(k)}$ (леммы 4,5,7).

Авторы искренне признательны члену-корреспонденту АН СССР профессору Н.Н.Говоруну за интерес к настоящим исследованиям и предоставленную возможность работы над ними.

Л и т е р а т у р а

1. В.П.Ильин, Ю.И.Кузнецов. Трехдиагональные матрицы и их приложения. М.: Наука, 1985.
2. Д.К.Фаддеев, В.Н.Фаддеева. Вычислительные методы линейной алгебры. Параллельные вычисления. Ленинград: Наука, 1975.
3. В.В.Воеводин. Вычислительные основы линейной алгебры. М.: Наука, 1977.
4. Г.А.Емельяненко. ОИЯИ, ПИ-86-531, Дубна, 1986.
5. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Я. Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. М.: Наука, 1983.
6. Морозов В.А. Регулярные методы решения некорректных задач. М., МГУ, 1974.
7. Березин М.С., Жидков И.П. Методы вычисления. М.: Физматгиз, 1962, т. I.
8. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б. Основы теории специальных функций. М.: Наука, 1974.
9. Суэтин П.К. Классические ортогональные многочлены. М.: Наука, 1976.
10. Уилкинсон Д.Ж. Алгебраическая проблема собственных значений. М.: Наука, 1970.
11. Кузнецов Ю.И. Треугольное разложение интерполяционной матрицы. Новосибирск, 1981 (Препринт ВЦ СО АН СССР, 90).
12. Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М.: Физматгиз, 1963.
13. Воеводин В.В., Волович В.М. Решение полной проблемы собственных значений для симметричной трехдиагональной матрицы методами бисекций и обратной итерации. - Вычислительные методы и программирование. М.: МГУ, 1974, вып. 22.
14. Ortega (Ortega J.M.) On Strum Sequences for tridiagonal matrices. - J.Assoc. Comput. Mach., 1960, 7, N 3, p. 260-263.

15. Перейра, Шерер (Pereyra V., Scherer G.) Eigenvalues of symmetric tridiagonal matrices: a fast, accurate and reliable algorithm.- J. Inst. Math. Appl., 1973, 12, N 2, p. 209-222.
16. Уилкинсон (Wilkinson J.H.) Calculation of the eigenvalues of a symmetric tridiagonal matrix by the method of bisection.- Numer. Math., 1962, 4, N 4, p. 362-367.
17. Биерк, Голуб (Björck A., Golub G.H.) Eigenproblems for matrices associated with periodic boundary conditions.- SIAM Review, 1977, 19, N 1, p. 5-16.
18. Кузнецов Ю.И. О собственных векторах симметричных циклических трехдиагональных матриц. Новосибирск, 1979 (Препринт/ВЦ СО АН СССР:62).
19. Воеводин В.В., Ким Г.Д., Агафонова З.И. О сходимости QR-алгоритма со сдвигом, сб.: Численный анализ на Фортране. М.: МГУ, 1976.
20. В.И.Крылов, В.В.Бобков, П.И.Монастырный. Начала теории вычислительных методов. Линейная алгебра и нелинейные уравнения. Минск: Наука и техника, 1985.
21. Gorgantini I. -Math. Comput., 1969, 23, No 106, 403-405.
22. Hirakawa Kazeburo -TRU Math., 1968, 4, 44-51.
23. Jayne Jahn W. -Proc. Edinburgh Math. Soc., 1969, 16. N 3. 251-253.
24. Martin R.S., Wilkinson J.H. -Numer. Math., 1968, 12. N 5. 377-383.
25. Wilkinsun J.H. -Linear Algebra and Applhe, 1968, 1. M 3, 409-420.
26. Rutischouser Heinz -Numer. Math., 1969, 13, N 1, 4-13.
27. FORTRANによる数値計算ハンドブック, 1978.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 июня 1988 года.

Емельяненко Г.А., Им Ён Сек P11-88-451

О компактных модификациях метода Бауэра для нахождения собственных значений трехдиагональных матриц

Получены эффективные корректные /неизвестные ранее/ модификации метода Бауэра /LR-алгоритма/ нахождения собственных значений для трехдиагональных матриц, все верхние главные угловые миноры которых отличны от нуля.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод О.С.Виноградовой

Emelyanenko G.A., Im Yen Sec P11-88-451

On Compact Modifications of Bauer's Method for Calculation of Eigenvalue of Tridiagonal Matrices

Effective correctable (unknown until) Bauer's method modification (LR-algorithm) for eigenvalue calculations of tridiagonal matrices in the case of all nonzero main angular minors are obtained.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988