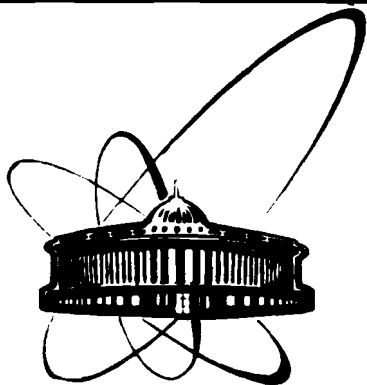


89-544



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

E 601

P11-89-544

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

Направлено в "Журнал вычислительной математики  
и математической физики"

\* Университет, Пхеньян, КНДР

# I. ВВЕДЕНИЕ

Обычно ( см., например, [3,4,II] или §46 гл.VI [I] и т.д. ) на практике при использовании QR- или LR - методов для вычисления всех собственных значений у  $A = \|a_{ij}\|_{i,j}$  матрицы общего вида осуществляется ( см., например, стр. 316 [4] либо стр. 427 + 492 [3] ) предварительное подобное сведение  $QAQ^T = H$  матрицы  $A$  к  $H$  - матрице Хессенберга ( правой почти треугольной матрице ). Далее качество найденных собственных значений матриц  $H$  ( и следовательно,  $A$  ) и время, затрачиваемое на ЭВМ на их получение, существенно зависят от способа выбора ускоряющих коэффициентов ( сдвигов )  $W$ .

В модифицированных LR- методах для нахождения собственных значений матриц в форме Хессенберга [I+4], т.е.

$$H = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & a_{m,m-1} & a_{mm} \end{bmatrix}, \quad (I.1)$$

$$\left. \begin{aligned} (H - WE) &= LR \rightarrow H = RL + WE \\ \lambda_i &= \lim_{k \rightarrow \infty} a_{ii}^{(k)}, \quad i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \right\}, \quad (I.2)$$

$$\left. \begin{aligned} (H - WE) &= LR \rightarrow H = RL \\ \lambda_i &= \lim_{k \rightarrow \infty} (a_{ii}^{(k)} + \sum_{n=1}^k W) \end{aligned} \right\}, \quad (I.3)$$

$a_{ii}^{(k)}$  - диагональные элементы итерационной матрицы  $H$ , итерационный коэффициент  $W$  ( сдвиг ) для ускорения сходимости обычно на практике выбирается как собственное значение матриц  $2 \times 2$

$$\begin{bmatrix} a_{i+1,i+1}^{(k)} & a_{i+1,i}^{(k)} \\ a_{i,i+1}^{(k)} & a_{ii}^{(k)} \end{bmatrix}. \quad (I.4)$$

ближайшее к элементу  $a_{ii}^{(k)}$  [2,4]. Наилучшие результаты ( по скорости сходимости ) получены, если для  $W$  выполнялось условие ( §24 г.8 [4] )

$$|W/W - 1| < \frac{1}{2}. \quad (I.5)$$

Такой способ выбора сдвига при поиске собственных значений  $H$  - вещественной матрицы является наиболее эффективным, если у  $H$  имеются комплексно-сопряженные собственные значения. Однако в настоящее время всё ещё не существует теории выбора оптимальной стратегии сдвигов, а также точных аналитических выражений для оценки скорости сходимости при выборе ускоряющих коэффициентов в общем виде ( см., например, [4] либо §46 и стр. 262+263 [I], а также §31 [I2] ).

В настоящей работе предлагается один из универсальных ( по нашему мнению ) способов выбора ускоряющих коэффициентов в модифицированных LR - алгоритмах для вычисления собственных значений вещественных

матриц в форме Хессенберга, который также может быть использован и для матриц с комплексными элементами. Обсуждаемый здесь способ выбора  $\overset{\infty}{W}$  основан на стратегии выбора ускоряющих коэффициентов в модифицированных алгоритмах для вычисления собственных значений вещественных трехдиагональных матриц общего вида, предложенной нами в [5] и реализованной в программах [6,7].

В настоящей работе мы также приводим описание стандартных программ на ФОРТРАНе ЭВМ ЕС-1061 и тестовые расчеты для вычисления собственных значений пяти-, семидиагональных вещественных матриц и матриц в форме Хессенберга, в которых реализованы алгоритмы, приведенные нами в [8] и в этой работе.

## 2. О способах выбора итерационных ускоряющих коэффициентов при поиске всех собственных значений матриц Хессенберга

В этом разделе дается обобщение предложенного нами [8,5] нового способа выбора ускоряющих итерационных коэффициентов при поиске всех собственных значений матриц Хессенберга с использованием LR-метода.

**Теорема 1.** Пусть собственные значения вещественной матрицы  $\overset{\infty}{H} = (\overset{\infty}{H} + \epsilon d)$ , у которой  $\overset{\infty}{H}$  есть верхняя почти треугольная матрица (т.е. матрица Хессенберга) общего вида (1.1) и  $d$  - начальный сдвиг\*, удовлетворяют следующему условию упорядоченности

$$|\lambda_1(d)| > |\lambda_2(d)| > \dots > |\lambda_m(d)| > 0. \quad (2.1)$$

Тогда если в LR-методе [1+4] для вычисления собственных значений матрицы  $\overset{\infty}{H}$  в форме Хессенберга (1.1) выбирать  $\overset{\infty}{W}_j$  - итерационные коэффициенты - сдвиги для любого  $j = m, m-1, \dots, 2$  и любого  $k = 1, 2, \dots$  в виде

$$\overset{\infty}{W}_j = \begin{cases} 0, & \text{если } |\overset{\infty}{a}_{j+1}^j| \geq 1 \\ \overset{\infty}{a}_{j+1}^j - \overset{\infty}{a}_{j+1}^j \overset{\infty}{a}_{j+1}^j / \overset{\infty}{a}_{j+1}^j, & \text{если } |\overset{\infty}{a}_{j+1}^j| < \epsilon_r < 1, \end{cases} \quad (2.2)$$

то в ускоренном таким образом LR-методе достигается не хуже чем квадратическое ускорение сходимости, т.е.

$$\overset{\infty}{a}_{j+1}^j(\overset{\infty}{W}_j) \rightarrow O(\epsilon_r^2). \quad (2.3)$$

**Доказательство.** При (2.1) имеет место  $\overset{\infty}{H} = \overset{\infty}{L} \overset{\infty}{R}$ , где

$$\overset{\infty}{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \gamma_2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_{m-1} & 1 \\ & & & \gamma_m & 1 \end{bmatrix}, \quad \overset{\infty}{R} = \begin{bmatrix} \overset{\infty}{r}_{11} & \overset{\infty}{r}_{12} & \dots & \overset{\infty}{r}_{1m} \\ & \overset{\infty}{r}_{22} & \dots & \overset{\infty}{r}_{2m} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & \overset{\infty}{r}_{mm} \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

\*) Общая стратегия выбора  $d$  - начального сдвига обсуждалась нами в [13], но в [14] нами описана оптимальная практическая стратегия.

Тогда модифицированный явный LR-алгоритм (1.2) для вычисления собственных значений матриц в форме Хессенберга имеет вид

$$\text{Если } |\overset{\infty}{a}_{i+1}^i| > \epsilon^k \text{ для любых } k = 1, 2, \dots, \text{ то} \quad (2.5)$$

$$\left. \begin{aligned} \overset{\infty}{l}_i &= \overset{\infty}{a}_{i+1}^i / \overset{\infty}{r}_{i+1,i}; \quad i = 2, 3, \dots, m; \\ \overset{\infty}{r}_{ii} &= (\overset{\infty}{a}_{ii} - \overset{\infty}{W}) - \overset{\infty}{l}_i \overset{\infty}{r}_{i+1,i}; \quad \overset{\infty}{r}_{ii} = \overset{\infty}{a}_{ii} - \overset{\infty}{W}; \quad i = 2, 3, \dots, m; \\ \overset{\infty}{r}_{i,n} &= \overset{\infty}{a}_{i,n} - \overset{\infty}{l}_i \overset{\infty}{r}_{i+1,n}; \quad \overset{\infty}{l}_i = 0; \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad n = i+1, \dots, m; \\ \overset{\infty}{a}_{i+1}^i &= \overset{\infty}{r}_{i+1,i} \overset{\infty}{l}_i, \quad i = 2, 3, \dots, m. \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \overset{\infty}{a}_{ii} &= (\overset{\infty}{r}_{ii} + \overset{\infty}{W}) + \overset{\infty}{r}_{i+1,i} \overset{\infty}{l}_{i+1}; \quad \overset{\infty}{a}_{mm} = \overset{\infty}{r}_{mm} + \overset{\infty}{W}, \text{ в случае (1.2);} \\ \overset{\infty}{a}_{ii} &= \overset{\infty}{r}_{ii} + \overset{\infty}{r}_{i+1,i} \overset{\infty}{l}_{i+1}; \quad \overset{\infty}{a}_{mm} = \overset{\infty}{r}_{mm}, \text{ в случае (1.3); } i = 1, 2, \dots, m-1; \\ \overset{\infty}{a}_{i,n} &= \overset{\infty}{r}_{i,n} + \overset{\infty}{r}_{i+1,n} \overset{\infty}{l}_{i+1}; \quad \overset{\infty}{a}_{im} = \overset{\infty}{r}_{im}; \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad n = i+1, \dots, m-1. \end{aligned} \right\} \quad (2.6)$$

$$\left. \begin{aligned} \lambda_i &= \lim_{k \rightarrow \infty} \overset{\infty}{a}_{ii} - d \text{ в случае (1.2),} \\ \lambda_i &= \lim_{k \rightarrow \infty} (\overset{\infty}{a}_{ii} + \sum_{p=1}^k \overset{\infty}{W}) - d \text{ в случае (1.3), } i = 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \right\} \quad (2.7)$$

Если  $|\overset{\infty}{a}_{i+1}^i| \leq \epsilon$  в любой итерации  $k = k^* \geq 2$  и некотором  $i = i^*$ , то

$$\left\{ \overset{\infty}{a}_{n,n-1} = 0, \quad \overset{\infty}{a}_{nn} = \overset{\infty}{a}_{nn} \right\}_{n=i^*}^m. \quad (2.8)$$

Если для некоторого  $k$  выполняется неравенство  $1 > |\overset{\infty}{a}_{i+1}^i| > \epsilon$  и выбирать ускоряющий коэффициент  $\overset{\infty}{W}_j$  в виде (2.2)<sub>2</sub>, то из (2.5) + (2.6), получаем

$$\overset{\infty}{a}_{i+1}^i = \left[ \prod_{n=1}^k \left( \frac{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}}{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i} \right) \cdot \overset{\infty}{l}_i \cdot \left( \frac{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}}{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i} \cdot \frac{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i}{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}} - 1 \right) \right] \overset{\infty}{a}_{i+1}^i \quad (2.9)$$

$$\left( \text{или } \frac{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i}{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i} = \frac{1}{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}} \left( \frac{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}}{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i} - \frac{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}}{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}} \right) \cdot \overset{\infty}{a}_{i+1}^i(\overset{\infty}{W}_j) \right). \quad (2.9')$$

Известно, что

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \overset{\infty}{l}_i = 0; \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \overset{\infty}{r}_{i+1,i} = \lim_{k \rightarrow \infty} \overset{\infty}{a}_{i+1}^i = \lambda_{i+1}; \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \overset{\infty}{a}_{i+1}^i = \lim_{k \rightarrow \infty} \overset{\infty}{r}_{i+1,i}$$

следовательно, выполняется соотношение

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left( \frac{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}}{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i} \cdot \frac{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i}{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}} - 1 \right) = 0.$$

Поэтому если положить

$$|\overset{\infty}{l}_i| \leq \epsilon_L, \quad \left| \frac{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}}{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i} \cdot \frac{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i}{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}} - 1 \right| \leq \epsilon_r,$$

и  $\epsilon_r = \max(\epsilon_L, \epsilon_r)$ , то

$$|\overset{\infty}{a}_{i+1}^i| \leq \left[ \prod_{n=1}^k \left| \frac{\overset{\infty}{r}_{i+1,i}}{\overset{\infty}{a}_{i+1}^i} \right| \cdot \epsilon_r \right] \cdot |\overset{\infty}{a}_{i+1}^i|, \text{ т.е. } \overset{\infty}{a}_{i+1}^i(\overset{\infty}{W}_j) \rightarrow O(\epsilon_r^k). \quad (2.10)$$

Теорема доказана.

х) Здесь и далее  $\epsilon$  - константа, определяемая разрядной сеткой ЭВМ.









Таблица 4

$$C_2 = \begin{cases} q_i = \begin{cases} 110 - 10 \cdot i, & \text{если } 1 \leq i \leq 11 \\ 10 \cdot i - 110, & \text{если } 12 \leq i \leq 21 \end{cases} \\ P_n = 1 = \tau_n; \quad n = 2, 3, \dots, 21 \end{cases}$$

	N	$\Delta_{Sp}$	$\Delta = (C - \lambda E) U(\lambda)$	$t_\lambda$	$t_{\lambda, u}$
DIM1	70	0.119371179608 · 10 <sup>-11</sup>	0.112772248081 · 10 <sup>-9</sup>	0.02559	0.105789
DMTQZ		0.102318153949 · 10 <sup>-11</sup>	0.429462541484 · 10 <sup>-8</sup>	0.03536	0.111572 <sup>*)</sup>
DHQRZ		0.818545231596 · 10 <sup>-11</sup>	0.604962244614 · 10 <sup>-7</sup>		0.261952 <sup>*)</sup>
DBSECT+ DTINVT		0.234618255490 · 10 <sup>-6</sup>	0.430588854865 · 10 <sup>-5</sup>	0.08798	0.115555 <sup>*)</sup>
MATLR5	76	0.176214598469 · 10 <sup>-11</sup>		0.04436	
MATLR7	82	0.909494701773 · 10 <sup>-12</sup>		0.07028	
DBWLR1	74	0.204636307899 · 10 <sup>-11</sup>		0.18976	
DBWLR2	45	0.341060513165 · 10 <sup>-12</sup>		0.17480	
DCOWLR	55	0.454747350886 · 10 <sup>-12</sup>		0.36119	
DESRGZ		0.818545231596 · 10 <sup>-11</sup>		0.12641 <sup>*)</sup>	
DCOMLR	43	0.102318153949 · 10 <sup>-11</sup>		0.33920	
DHQR	24	0.818545232 · 10 <sup>-11</sup>		0.22873	

\*) Здесь дано время работы соответствующей стандартной программы из постоянной библиотеки ЭВМ ЕС - 1061.

ж) Все собственные значения, вычисленные с помощью стандартной программы DCOMLR, имеют мнимую часть, хотя матрица  $C_2$  симметрическая и у неё не должно быть комплексных собственных значений. Следовательно, появление вычисленных комплексных собственных значений есть следствие отмеченной во введении стратегии выбора ускоряющих коэффициентов  $W$ .

Таблица 5

$$H_1 = \begin{pmatrix} 5 & -2.5 & 3 & -2.5 \\ 1 & 2 & 2.5 & -2.5 \\ & -1 & 7 & -3 \\ & & 2 & 2 \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \lambda_1 = \lambda_2 = 4 - i \\ \lambda_3 = \lambda_4 = 4 + i \end{cases} - \text{точные собственные значения}$$

	Собственные значения				$\Delta_{Sp}$	M	$t_\lambda$
	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\lambda_4$			
DBWLR1	4.0	4.0	4.0	4.0	0.0		0.00206
	1.0	-1.0	1.0	-1.0			
DHQR	0.3999958 · 10 <sup>1</sup>	0.3999958 · 10 <sup>1</sup>	0.4000042 · 10 <sup>1</sup>	0.4000042 · 10 <sup>1</sup>	0.7016610 · 10 <sup>-13</sup>		0.01726
	0.1000065 · 10 <sup>1</sup>	-0.1000065 · 10 <sup>1</sup>	0.99999351 · 10 <sup>0</sup>	-0.99999351 · 10 <sup>0</sup>			
DCOMLR	0.4000007 · 10 <sup>1</sup>	0.3999993 · 10 <sup>1</sup>	0.4000127 · 10 <sup>1</sup>	0.3999873 · 10 <sup>1</sup>	0.2886580 · 10 <sup>-14</sup>		0.00930
	0.1000086 · 10 <sup>1</sup>	0.99999143 · 10 <sup>0</sup>	-0.1000046 · 10 <sup>1</sup>	-0.99999541 · 10 <sup>0</sup>			

Таблица 6

$$H_2 = \begin{pmatrix} 1 & -2 & -4 & -4 \\ 1 & 7 & 7 & 6 \\ & -2 & -1 & -4 \\ & & 1 & 5 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 - \text{точные собственные значения}$$

	Собственные значения				$\Delta_{Sp}$	M	$t_\lambda$
	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\lambda_4$			
DBWLR1	3.0	3.0	3.0	3.0	0.0		0.00229
	0.0	0.0	0.0	0.0			
DHQR	0.29996097 · 10 <sup>1</sup>	0.30001319 · 10 <sup>1</sup>	0.30001319 · 10 <sup>1</sup>	0.30001265 · 10 <sup>1</sup>	0.5861976 · 10 <sup>-13</sup>		0.01971
	0.0	0.31874964 · 10 <sup>-3</sup>	-0.31874964 · 10 <sup>-3</sup>	0.0			
DCOMLR	0.30001757 · 10 <sup>1</sup>	0.30000022 · 10 <sup>1</sup>	0.30000006 · 10 <sup>1</sup>	0.29998215 · 10 <sup>1</sup>	0.1199041 · 10 <sup>-13</sup>		0.02456
	0.86514962 · 10 <sup>-6</sup>	-0.17721099 · 10 <sup>-3</sup>	0.17707260 · 10 <sup>-3</sup>	-0.72676495 · 10 <sup>-6</sup>			



Таблица 7

		DBWLR1	DBWLR2	DHGR	DCOWLR	DCOMLR
10	$\Delta_5$	0.5329071 · 10 <sup>-13</sup>	0.3197442 · 10 <sup>-13</sup>	0.1421086 · 10 <sup>-12</sup>	0.3197442 · 10 <sup>-13</sup>	0.3552714 · 10 <sup>-13</sup>
	$t_1$	0.024642	0.051712	0.057373	0.100296	0.118088
	$N$	29	30	11	33	30
100	$\Delta_5$	0.4636291 · 10 <sup>-11</sup>	0.2607692 · 10 <sup>-11</sup>	0.1463718 · 10 <sup>-10</sup>	0.2525979 · 10 <sup>-11</sup>	0.2948752 · 10 <sup>-11</sup>
	$t_1$	11.347457	21.900970	24.981109	46.806656	48.460529
	$N$	304	283	120	286	277
200	$\Delta_5$	0.2108891 · 10 <sup>-10</sup>	0.1080025 · 10 <sup>-11</sup>	0.5434231 · 10 <sup>-10</sup>		
	$t_1$	86.257600	165.667039	179.997329		
	$N$	600	566	237		
12	$\Delta_5$	0.2060574 · 10 <sup>-12</sup>	0.2060574 · 10 <sup>-12</sup>	0.6892265 · 10 <sup>-12</sup>	0.2060574 · 10 <sup>-12</sup>	0.2629008 · 10 <sup>-12</sup>
	$t_1$	0.063537	0.063980	0.098473	0.129166	0.122314
	$N$	32	32	14	32	26

$$H_3 = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & & \dots & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$H_4 = \begin{bmatrix} 12 & 11 & 10 & \dots & 1 \\ 11 & 11 & 10 & \dots & 1 \\ & & & \dots & \\ & & & & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

х) При вычислении собственных значений матриц  $H_3$  и  $H_4$  с использованием стандартной программы DCOMLR найдется комплексные собственные значения (хотя у этих матриц все собственные значения вещественны), что опять-таки является следствием стандартной стратегии выбора  $W$ .

## Л и т е р а т у р а

1. В. В. Воеводин. Вычислительные основы линейной алгебры. М., Наука, 1977.
2. FORTRAN による数値計算ハンドブック. 1976.
3. Дж. Х. Уилкинсон. Алгебраическая проблема собственных значений. М., Наука, 1970.
4. Уилкинсон Райнш. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М., Машиностроение, 1976.
5. Г. А. Емельяненко, Им Ён Сек. ОИЯИ, РИ-88-453, Дубна, 1988.
6. Г. А. Емельяненко, Им Ён Сек. ОИЯИ, РИ-88-787, Дубна, 1988.
7. Г. А. Емельяненко, Им Ён Сек. ОИЯИ, РИ-88-921, Дубна, 1988.
8. Г. А. Емельяненко, Им Ён Сек. ОИЯИ, РИ-89-543, Дубна, 1989.
9. В. В. Воеводин. Линейная алгебра. М., Наука, 1980.
10. Р. Н. Федорова, А. И. Широкова. Библиотека программ на ФОРТРАНе. т. VI. Описание программ. Дубна, 1983.
11. Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М., Физматгиз., 1963.
12. В. В. Воеводин, Ю. А. Кузнецов. Матрицы и вычисления. М., Наука, 1984.
13. Г. А. Емельяненко, Им Ён Сек. ОИЯИ, РИ-88-452, Дубна, 1988.
14. Г. А. Емельяненко, Им Ён Сек. ОИЯИ, РИ-88-736, Дубна, 1988.
15. Ю. А. Будагов, Г. А. Емельяненко, В. Г. Одинцов. ОИЯИ, РИ-9950, Дубна, 1976.

Рукопись поступила в издательский отдел  
19 июля 1989 года.