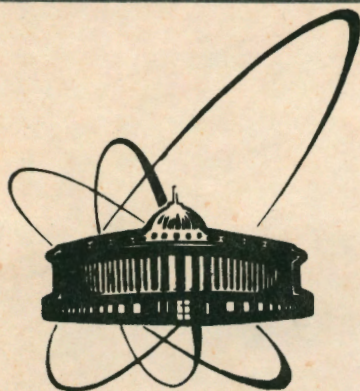


90-302



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

E-601

P11-90-302

Г.А.Емельяненко, Им Ен Сек*, А.И.Салтыков

ОПИСАНИЕ СИСТЕМЫ НОВЫХ ПРОГРАММ
НА ФОРТРАНЕ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ
СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ
И СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРОВ МАТРИЦ

*Университет. Пхеньян, КНДР

1990

ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа посвящена описанию стандартных программ на ФОРТ-РАНе для решения на ЭВМ ЕС-1061 алгебраической проблемы собственных значений вещественных матриц на основе модифицированных LR - алгоритмов, разработанных в [1+4, 7+13].

Хорошо известно, что для решения алгебраической проблемы собственных значений матриц уже имеется пакет EISPACK [6] эффективных программ. В программах этого пакета реализован широкий класс алгоритмов, связанных с вычислениями собственных значений и собственных векторов произвольных действительных или комплексных матриц.

В настоящее время, как отмечено в [4, 9+10, 12, 13], созданы новые стандартные программы для вычисления собственных значений вещественных трех-, пяти-, семидиагональных и хессенберговых матриц. Основные характеристики этих программ не хуже, чем аналогичные характеристики уже известных подобных стандартных программ, а время счета более чем в два раза меньше.

В настоящей работе дано описание наиболее эффективных программ из приведенных нами ранее в [4, 9+10, 12] работах для вычисления собственных значений трехдиагональных и хессенберговых матриц и собственных векторов трехдиагональных матриц. Здесь также приведено описание новых программ для вычисления собственных значений симметричных трехдиагональных матриц, а также вещественных как симметричных, так и несимметричных матриц.

В этой работе в дополнение к программам из [4, 9+10, 12] содержится описание 10 новых подпрограмм. Все подпрограммы используют арифметику с двойной точностью. В некоторых подпрограммах имеется машинозависимая константа EPS, равная 1.E-16 для ЭВМ серии ЕС. В подпрограммах печать выходной информации не предусмотрена.

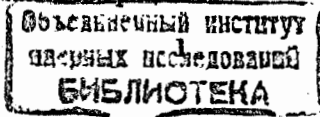
I. Описание программы (DTWLR1) вычисления собственных значений действительной симметрической трехдиагональной матрицы

Программа вычисляет все собственные значения действительной симметрической трехдиагональной матрицы на основе полученного в [1] λ -алгоритма и нетрадиционного способа выбора ускоряющих сдвигов (см. теорему 2 в [1]).

Обращение к подпрограмме

Здесь: CALL DTWLR1(M,R,Q,IBRR,P,D)

M - порядок заданной матрицы.



R - вещественный одномерный массив размерности M, последние M - I элементов которого на входе содержат внедиагональные элементы симметрической трехдиагональной матрицы, а R(1)=0. На выходе массив сохраняется.

Q - вещественный одномерный массив размерности M, содержащий на входе диагональные элементы исходной матрицы, а на выходе - собственные значения этой матрицы. Упорядочение собственных значений не производится.

P, D - вещественные одномерные рабочие массивы размерности M. IERR - целая переменная, характеризующая результат работы программы. Если при вычислении некоторого собственного значения требуется более 30 итераций, то работа программы заканчивается, и IERR выдается равным номеру этого собственного значения. При этом правильно вычисленными будут в массиве Q лишь собственные значения с номерами IERR+1, IERR+2, ..., M. Если IERR=0, то все собственные значения считаются вычисленными верно, и для вычисления каждого из них потребовалось не более 30 итераций.

2. Описание программы (DTWLR3) вычисления собственных значений действительной симметрической трехдиагональной матрицы

Программа вычисляет все собственные значения действительной симметрической трехдиагональной матрицы на основе полученного в [1] λ_{wd} -алгоритма и отмеченного выше нетрадиционного способа выбора ускоряющих сдвигов.

Обращение к подпрограмме

CALL DTWLR3(M,R,Q,IERR,P,T)

В этой программе смысл параметров M,R,Q,IERR,P и T одинаков соответственно с параметрами M,R,Q,IERR, P и D в DTWLR1.

3. Описание программы (DTWLR2) вычисления всех собственных значений и собственных векторов действительной симметрической трехдиагональной матрицы

Программа вычисляет все собственные значения и собственные векторы действительной симметрической трехдиагональной матрицы. В программе используются отмеченные выше алгоритмы вычисления собственных значений и алгоритм вычисления собственных векторов, разработанный в [2] (см.

стр. II [2]). При необходимости (т.е. при неудовлетворительной невязке $\Delta = \max |(C-\lambda_j E)z(\lambda_j)| > \varepsilon$) делается уточнение собственного вектора $z(\lambda_j)$ по методу обратных итераций [9].

Обращение к подпрограмме

CALL DTWLR2(N,R,Q,IERR,D,Z,P,C,MI,NI)

Здесь: N - порядок заданной матрицы.

R, Q - вещественные одномерные массивы размерности N, содержащие на входе соответственно внедиагональные и диагональные элементы симметрической трехдиагональной матрицы, а R(1)=0. На выходе массивы сохраняются.

D - вещественный одномерный массив размерности N, содержащий на выходе собственные значения исходной матрицы.

Z - вещественный двумерный массив Z(N,N), содержащий в столбцах на выходе нормализованные собственные векторы, соответствующие собственным значениям.

P, C - вещественные одномерные рабочие массивы размерности N. MI, NI - целые одномерные рабочие массивы размерности N в методе немонотонной прогонки при осуществлении обратных итераций для уточнения собственных векторов.

IERR - целая переменная, характеризующая результат работы программы. Если при вычислении некоторого собственного значения требуется более 30 итераций, то работа программы заканчивается, и IERR равно номеру этого собственного значения. При этом все собственные значения с номерами IERR+1, IERR+2, ..., M в массиве D и соответствующие им собственные векторы в массиве Z верны. Если IERR=0, то все собственные значения и векторы считаются вычисленными верно и при вычислении каждого собственного значения сделано не более 30 итераций.

4. Описание программы (DGAIM) вычисления собственных значений действительной трехдиагональной матрицы с ненулевыми внедиагональными элементами.

Программа вычисляет с использованием отмеченного выше λ_{wd} -метода все собственные значения действительной трехдиагональной матрицы с ненулевыми внедиагональными элементами с анализом кратности собственных значений и способов выбора сдвигов на основе результатов [1] и

[2] (см. теорему 1 и теорему 2 в [1] и теорему 2, леммы 5, 6 в [3]).

Программа представляет собой модификацию программы DGAIM4 [12].

Обращение к подпрограмме

CALL DGAIM(L, P, R, Q, IERR, EPS, INDEX, B)

Здесь: L - порядок заданной матрицы.

P, R, Q - вещественные одномерные массивы размерности L, содержащие на входе соответственно поддиагональные, наддиагональные и диагональные элементы исходной матрицы. При этом $R(1)=0=P(1)$. На выходе массивы Q и R содержат соответственно действительные и мнимые части собственных значений, а массив R сохраняется.

B - вещественный рабочий одномерный массив размерности L, связанный с проверкой появления в итерационных процессах нулевых ведущих миноров.

INDEX - целый одномерный массив размерности L, который на выходе содержит целые нули и единицы. Единица является признаком простого собственного значения, а нуль - признаком кратного. Если в J - ячейке массива INDEX единица, т.е. $INDEX(J)=1$, то J - собственное значение в массиве Q является простым собственным значением.

IERR - целая переменная, характеризующая результат работы программы. Если на выходе $IERR=1$, то вычисления считаются неудовлетворительными, т.к. потребовалось число итераций для вычисления всех собственных значений больше чем $5 \cdot L$, но необходимая точность не достигнута. Если $IERR=0$, то все собственные значения найдены с удовлетворительной точностью.

EPS - переменная, задаваемая на входе. Для ЭВМ серии ЕС, например, она равна 10^{-16} .

Если такая матрица имеет λ -кратные, то она непростой структуры [2].

5. Описание программы (DВЕКТО) вычисления собственных векторов действительной трехдиагональной матрицы с ненулевыми внедиагональными элементами.

Программа вычисляет все собственные и присоединенные векторы действительной трехдиагональной матрицы с ненулевыми внедиагональными элементами на основе алгоритмов, полученных в [2] (см. следствие 2, следствие 3). Программа уже была описана нами ранее в [9] и её описание здесь повторяется для полноты картины о созданном новом пакете.

Обращение к подпрограмме

CALL DВЕКТО(M, P, R, Q, AL, BL, U, INDEX, B, C, MI, NI, EPS)

Здесь: M - порядок заданной матрицы.

P, R, Q - вещественные одномерные массивы размерности M, содержащие на входе соответственно поддиагональные, наддиагональные и диагональные элементы исходной матрицы. При этом $R(1)=0=P(1)$. На выходе эти массивы сохраняются.

AL, BL - вещественные одномерные массивы размерности M, содержащие на входе соответственно действительные и мнимые части собственных значений.

B, C - вещественные одномерные рабочие массивы размерности M. MI, NI - целые одномерные рабочие массивы размерности M. INDEX, EPS - целый одномерный массив размерности M и переменная соответственно, смысл которых одинаков с INDEX и EPS в DGAIM. Они задаются на входе.

U - вещественный двумерный массив размерности $M \times M$, содержащий (в столбцах) на выходе из подпрограммы собственные и соответствующие им присоединенные векторы. Если в J - ячейке массива INDEX единица, т.е. $INDEX(J)=1$, то J - столбец массива U содержит $U(\lambda_j)$ - собственный вектор, соответствующий вещественному собственному значению λ_j . В случае комплексного $\lambda_j = a + i b$ собственного значения мнимая часть $Y(\lambda_j)$ собственного вектора $U(\lambda_j) = X(\lambda_j) + i Y(\lambda_j)$ содержится в J+1 ячейке массива U. При этом сопряженный собственный вектор $U(\bar{\lambda}_j) = X(\lambda_j) - i Y(\lambda_j)$ в массиве U не хранится, а выбирается самим пользователем в соответствии с данным выше определением.

6. Описание программы (DIM1) вычисления собственных значений и собственных векторов действительной трехдиагональной матрицы с ненулевыми внедиагональными элементами

Программа вычисляет все собственные значения и собственные (присоединенные) векторы действительной трехдиагональной матрицы с ненулевыми внедиагональными элементами, используя отмеченные выше подпрограммы DGAIM и DВЕКТО.

Обращение к подпрограмме

CALL DIM1(M, P, R, AL, BL, U, INDEX, B, C, MI, NI, EPS, IERR)

В этой программе смысл параметров одинаков соответственно с параметрами в DVEKTO кроме параметра IERR. Параметр IERR имеет смысл, одинаковый с IERR в DGAIM.

7. Описание программы (DGI4) вычисления собственных значений действительной трехдиагональной матрицы общего вида

Программа вычисляет все собственные значения действительной трехдиагональной матрицы общего вида на основе полученных в [3] алгоритмов (см. теорему 1, леммы 3+6, теорему 2) и способа выбора ускоряющих сдвигов, полученного в [1] (см. теорему 2 в [1]).

Настоящая программа представляет собой модификацию программы DGI4 [12].

Если исходная трехдиагональная матрица имеет некоторые нулевые внедиагональные элементы, то программа DGI4 быстрее работает, чем программа DGAIM, так как в этой программе учитывается результат леммы 4 в [3].

Обращение к подпрограмме

CALL DGI4(M, R, P, Q, IERR, NP, EPS, B)

Здесь: M, R, P, Q, IERR, B и EPS имеют соответственно одинаковый смысл с L, R, P, Q, IERR, B и EPS в DGAIM, а NP — целый одномерный рабочий массив размерности M.

Замечание I. Мы не повторяем здесь описание ранее опубликованных нами [4] программ MATLR5 и MATLR7 вычисления спектров пяти- и семидиагональных матриц. Отметим лишь только, что в указанных программах периодически осуществляется контроль (с помощью сдвигов) за диагональным преобладанием матриц.

8. Описание программы (DBHWLR) вычисления собственных значений вещественной квадратной матрицы в верхней форме Хессенберга

Программа является модифицированным вариантом программы DBWLR2 [4] и вычисляет все собственные значения действительной квадратной матрицы в верхней форме Хессенберга на основе LR — алгоритма с использованием

перестановок и разработанного в [4] (см. теорему 1) способа выбора ускоряющих сдвигов.

Обращение к подпрограмме

CALL DBHWLR(N, EPS, A, WR, WI, IERR)

Здесь: A — вещественный двумерный массив $A(N, N)$, содержащий на входе элементы исходной верхней матрицы Хессенберга. N, EPS, WR, WI и IERR имеют соответственно одинаковый смысл с M, EPS, AL, BL и IERR в DGI4.

9. Описание программы (DTRWLR) вычисления собственных значений вещественной симметрической матрицы

Программа вычисляет все собственные значения вещественной симметрической матрицы.

При этом, используя отражения — ортогональные преобразования подобия (см., например, стр. 190 [5]), исходную матрицу, приводим сначала к симметричной трехдиагональной матрице, собственные значения которой находятся с использованием программы DTWLR1.

Обращение к подпрограмме

CALL DTRWLR(N, A, Q, IERR, R, P, D)

Здесь: N — порядок исходной матрицы.

A — вещественный двумерный массив $A(N, N)$, содержащий на входе элементы исходной матрицы.

Q — вещественный одномерный массив размерности N, содержащий на выходе собственные значения.

R, P, D — вещественные рабочие одномерные массивы размерности N.

IERR — целая переменная, которая имеет одинаковый смысл с IERR в программе DTWLR1.

10. Описание программы (DBWLR1) вычисления собственных значений вещественной квадратной матрицы общего вида

Программа вычисляет все собственные значения вещественной квадратной матрицы общего вида. При этом выполнено комбинирование стандартной

программы DBWMLS из библиотеки "Дубна" (см., например, [6]), которая сначала приводит действительную матрицу общего вида к верхней форме Хессенберга, с описанной выше нашей программой DBHWLR .

Обращение к подпрограмме

CALL DBWLR1(N, EPS, A, IERR, WR, WI, INT)

Здесь: N - порядок исходной матрицы.

A - вещественный двумерный массив A(N,N) , содержащий на входе элементы исходной матрицы.

WR , WI - вещественные одномерные массивы размерности N , содержащие соответственно на выходе действительные и мнимые части собственных значений.

INT - целый одномерный массив размерности N .

IERR, EPS - имеют соответственно одинаковый смысл с IERR и EPS в DBHWLR .

Замечание 2. Мы не приводим здесь таблицы тестовых численных экспериментов, свидетельствующих в пользу новых программ в сравнении их с аналогичными [6] стандартными программами. Многочисленные такие таблицы нами были уже помещены, например, в [4,9,10,12]. В [10] дано описание программ DIM2 и DGAE2 для вычисления отдельных корневых векторов.

II. Описание программы (DTWIG) вычисления некоторых собственных векторов действительной симметрической трехдиагональной матрицы

Программа вычисляет отдельные собственные векторы действительной симметрической трехдиагональной матрицы. В программе используется тот же алгоритм вычисления собственных векторов, как и в программе DTWLR2 . При необходимости делается также уточнение собственных векторов подобно программе DTWLR2 .

Обращение к подпрограмме

CALL DTWIG(N, M, D, R, Q, Z, P, S, MI, NI)

Здесь: N - порядок заданной матрицы.

M - количество заданных собственных значений, для которых требуется определить соответствующие собственные векторы.

D - вещественный массив размерности M , содержащий на входе M заданных собственных значений симметрической трехдиагональной матрицы. Собственные значения не обязательно упорядочены.

R, Q - вещественные одномерные массивы размерности N , содержащие соответственно на входе внедиагональные и диагональные элементы исходной матрицы, а R(1)=0 .

Z - вещественный двумерный массив Z(N,M) , содержащий на выходе M ортогональных собственных векторов исходной матрицы, соответствующих M собственным значениям в массиве D . Векторы нормированы на 1 .

P, S - вещественные одномерные рабочие массивы размерности N . MI, NI - целые одномерные рабочие массивы размерности N .

Если для уточнения некоторого собственного вектора требуется более 3 итераций, то программа выдает сообщение (печатается IER = L) , где L - порядковый номер собственного значения в массиве D . После этого сообщения программа продолжает вычисление следующих собственных векторов. Если же все собственные векторы определены не более чем за 3 итерации, то никаких сообщений не печатается. Для большинства же практических задач в этой программе, как и в программе DTWLR2 , блок итерационного уточнения работает, как правило, редко.

Заключение

В заключение отметим, что в работе дано краткое описание системы новых эффективных стандартных программ на ФОРТРАНе для вычисления спектра и собственных векторов матриц.

Благодарности

Авторы считают своим долгом отметить благоприятную роль члена-корреспондента АН СССР, профессора Н.Н.Говоруна в успешно выполненном цикле работ [1+, 7+13].

Литература

- 1 . Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Препринт ОИЯИ PII-88-453, Дубна, 1988.
- 2 . Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Препринт ОИЯИ PII-88-736, Дубна, 1988.
- 3 . Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Препринт ОИЯИ PII-88-920, Дубна, 1988.
- 4 . Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Препринт ОИЯИ PII-89-544, Дубна, 1989.
- 5 . Уилкинсон Райнш. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М. "Машиностроение" 1976.
- 6 . Р.Н.Федорова, А.И.Широкова. Библиотека программ на ФОРТРАНе. т.VI. Описания программ. Дубна, 1983.
- 7 . Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Препринт ОИЯИ PII-88-451, Дубна, 1988.
- 8 . Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Препринт ОИЯИ PII-88-452, Дубна, 1988.
- 9 . Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Препринт ОИЯИ PII-88-787, Дубна, 1988.
10. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Препринт ОИЯИ PII-88-921, Дубна, 1988.

11. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Препринт ОИЯИ РII-89-543, Дубна, 1989.
12. Им Ён Сек. Методы вычисления спектра, а также собственных (корневых) векторов трех-, пяти- и семидиагональных матриц. II-89-885, Дубна, 1989.
13. Г.А.Емельяненко, Им Ён Сек, Деп. пуб. СИЯИ ВI-II-89-574, Дубна, 1989.

Рукопись поступила в издательский отдел
28 апреля 1990 года.

Емельяненко Г.А., Им Ен Сек, Салтыков А.И. P11-90-302

Описание системы новых программ
на ФОРТРАНе для вычисления собственных
значений и собственных векторов матриц

Приведено описание системы новых программ на ФОРТРАНе для вычисления собственных значений и собственных векторов вещественных матриц на основе модифицированных LR-алгоритмов и нетрадиционного способа выбора ускоряющих сдвигов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1990

Перевод авторов

Emel'yanenko G.A., Im Yen Sec, Saltykov A.I. P11-90-302

The Description of the System of New
FORTRAN Program for Eigenvalue and
Eigenvector Calculation of Matrices

The description of the system of new FORTRAN subroutines for eigenvalue and eigenvector calculation of the real matrices based on modified LR-algorithms and nontraditional method of speed-up coefficient choice is given.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1990