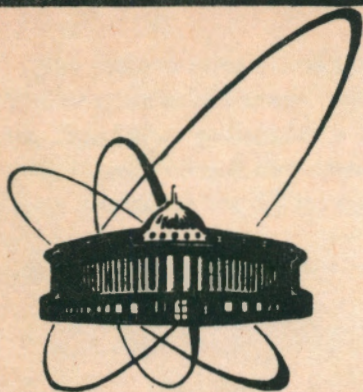


92-434



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P11-92-434

С. И. Сердюкова

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ СИММЕТРИЧНЫХ
ТРЕХДИАГОНАЛЬНЫХ МАТРИЦ.
ВЫЧИСЛЕНИЕ СИСТЕМЫ ДИСКРЕТНЫХ
ОРТОГОНАЛЬНЫХ МНОГОЧЛЕНОВ
С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ВЕСОМ

Направлено в журнал "RNAME"

1992

Эта работа посвящена проблеме численного решения обратной "симметричной" задачи для симметричных трёхдиагональных матриц. Проблема возникает в связи с исследованием перестройки спектров в дискретной квантовой механике [4]. Движение волн на решётках описывается [7] дискретным уравнением Шредингера:

$$-[\psi(n+1) - 2\psi(n) + \psi(n-1)]/2\Delta^2 + V(n)\psi(n) = E\psi(n),$$

$$n = 1, \dots, N,$$

$$\psi(0) = \psi(N+1) = 0.$$

Когда $V(n) = 0$, мы имеем спектральную задачу для матрицы

$$D = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Известно, что матрица D имеет различные собственные значения

$$\lambda_j = 2 - 2 \cos(j\pi/(N+1)), \quad j = 1, \dots, N,$$

которым отвечает полный ортонормированный базис собственных векторов E_j ,

$$E_j(i) = \left\{ \sin\left(\frac{ij\pi}{N+1}\right) / \sqrt{(N+1)/2} \right\},$$

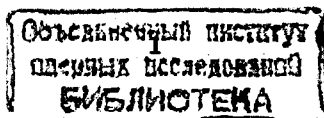
$$i, j = 1, \dots, N.$$

Заметим, что собственные векторы "симметричны":

$$E_j(1) = (-1)^{j-1} E_j(N). \quad (0.1)$$

Обратная Задача 1: найти симметричную трёхдиагональную матрицу с заданными различными собственными значениями λ_j (имеются в виду исходные λ_j) и заданными первыми компонентами ортонормальных собственных векторов

$$\tilde{E}_j^2(1) = E_j^2(1) + \Delta_j, \quad j = 1, \dots, N,$$



$$\sum_{j=1}^N \tilde{E}_j^2(1) = 1, \quad \sum_{j=1}^N \Delta_j = 0.$$

Здесь $E_j(1)$ – первые компоненты исходных собственных векторов. (Энергетические уровни сохраняются, возмущаются нормировочные константы. При этом “симметрия” ортонормальных собственных векторов не сохраняется.)

Обратная Задача 2: найти симметричную трёхдиагональную матрицу с заданными различными собственными значениями $\tilde{\lambda}_j$, $j = 1, \dots, N$ и “симметричными” ортонормальными собственными векторами. (На этот раз возмущаются энергетические уровни и требуется, чтобы сохранялись условия “симметрии”(0.1).)

В параграфе 1 я получаю аналитическую формулу для собственных векторов (*Лемма 1*), из которых следует формула (1.3) для первых компонент ортонормальных собственных векторов, удовлетворяющих условиям “симметрии” (0.1).

В параграфе 2 приводится численный алгоритм решения обратных задач (*Задачи 1 и Задачи 2*). В конце параграфа 2 даётся приложение к вычислению системы дискретных ортогональных многочленов с произвольным весом.

В параграфе 3 обсуждаются результаты численных экспериментов. Кроме того, обсуждается проблема проверки полученных результатов. На конкретных примерах демонстрируется преимущество предложенного численного алгоритма.

1. Структура собственных векторов

Прежде всего разберёмся, как устроены собственные векторы симметричной трёхдиагональной матрицы. Справедлива следующая *Лемма*.

Лемма 1. Если симметричная трёхдиагональная матрица

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 2+x_1 & -1+u_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1+u_1 & 2+x_2 & -1+u_2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1+u_{N-1} & 2+x_N \end{bmatrix}$$

имеет различные собственные значения $\tilde{\lambda}_j = 2 + \theta_j$, $j = 1, \dots, N$, и первые компоненты ортонормальных собственных векторов $E_j(1) = c_j$, $c_j \neq 0$, тогда последние компоненты определяются формулой

$$E_j(N) = \frac{(-1)^{j-1}(1-u_1)\dots(1-u_{N-1})}{c_j(\theta_j - \theta_1)\dots(\theta_j - \theta_{j-1})(\theta_{j+1} - \theta_j)\dots(\theta_N - \theta_j)}. \quad (1.1)$$

Эта формула есть в [6]. Но я надеюсь, что моё элементарное доказательство представляет интерес.

Доказательство. По определению, $\tilde{D}E_j = \tilde{\lambda}_j E_j$, $E_j(1) = c_j$. Отсюда следует, что

$$E_j(2) = \frac{x_1 - \theta_j}{1 - u_1} c_j,$$

$$\begin{aligned} E_j(i+1) &= -\frac{1-u_{i-1}}{1-u_i} E_j(i-1) + \frac{x_i - \theta_j}{1-u_i} E_j(i) \\ &= a_i E_j(i-1) + b_i E_j(i) - \frac{\theta_j}{1-u_i} E_j(i) = \dots \\ &= P_{i-1}(\theta_j) c_j + \frac{(-\theta_j)^i c_j}{(1-u_i)(1-u_{i-1})\dots(1-u_1)}, \\ & \quad i = 1, \dots, N-1. \end{aligned}$$

Здесь $P_i(\theta_j)$ – полином порядка i . Его коэффициенты зависят только от $x_1, \dots, x_i, u_1, \dots, u_i$ (не зависят от j !). По предположению, \tilde{E}_j составляют ортонормированный базис. Рассмотрим матрицу

$$T = [E_1, \dots, E_N].$$

Известно [2], что

$$TT^* = E, \quad \tilde{D} = T\tilde{\Lambda}T^*, \quad \tilde{\Lambda} = \text{diag}(\tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_N). \quad (1.2)$$

Заметим, что $y_\xi = E_\xi(N)$ являются решением системы

$$TY = \mathcal{E}_N, \quad \mathcal{E}_N(\xi) = \delta_{N\xi},$$

которая записывается в виде

$$\begin{bmatrix} c_1 & \dots & c_N \\ \frac{x_1 - \theta_1}{1 - u_1} c_1 & \dots & \frac{x_1 - \theta_N}{1 - u_1} c_N \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{P_{N-2}(\theta_1) + (-\theta_1)^{N-1}}{(1 - u_1) \dots (1 - u_{N-1})} c_1 & \dots & \frac{P_{N-2}(\theta_N) + (-\theta_N)^{N-1}}{(1 - u_1) \dots (1 - u_{N-1})} c_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

Отсюда следует, что

$$y_j = \frac{(-1)^{(N+j)} \Delta_{N-1}(j)}{\Delta_N}$$

Здесь $\Delta_N = \det(T)$ и $\Delta_{N-1}(j) = \det(T_c(j))$. Матрица $T_c(j)$ получается из матрицы T удалением j -го столбца и последней строки. Избавляемся от всех полиномов $P_i(\theta_j)$ в Δ_N простым вычитанием из каждой строки линейной комбинации предшествующих строк с подходящими коэффициентами. После этого выносим множители c_j из столбцов и множители $(1 - u_1)^{-1} \dots (1 - u_i)^{-1}$ из строк. Используя известную формулу для определителя Вандермонда (см., например, [3]), получаем

$$\begin{aligned} \Delta_N &= \frac{c_1 \dots c_N}{(1 - u_1)^{N-1} (1 - u_2)^{N-2} \dots (1 - u_{N-1})} \\ &\times \det \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ -\theta_1 & \dots & -\theta_N \\ \vdots & & \vdots \\ (-\theta_1)^{N-1} & \dots & (-\theta_N)^{N-1} \end{bmatrix} \\ &= \frac{c_1 \dots c_N (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}}}{(1 - u_1)^{N-1} (1 - u_2)^{N-2} \dots (1 - u_{N-1})} \prod_{1 \leq i < \xi \leq N} (\theta_\xi - \theta_i). \end{aligned}$$

Аналогично находим

$$\Delta_{N-1}(j) = \frac{c_1 \dots c_N (-1)^{\frac{N(N-1)}{2} - (N-1)}}{c_j (1 - u_1)^{(N-2)} (1 - u_2)^{(N-3)} \dots (1 - u_{N-2})} \prod_{\substack{1 \leq i < \xi \leq N \\ i \neq j, \xi \neq j}} (\theta_\xi - \theta_i).$$

Отсюда следует, что

$$y_j = E_j(N) = \frac{(-1)^{j-1} (1 - u_1) (1 - u_2) \dots (1 - u_{N-1})}{c_j (\theta_j - \theta_1) \dots (\theta_j - \theta_{j-1}) (\theta_{j+1} - \theta_j) \dots (\theta_N - \theta_j)}.$$

Ортонормальность вместе с только что доказанным соотношением (1.1) влекут следующее утверждение.

Предложение 1. Пусть симметричная трёхдиагональная матрица \tilde{D} имеет различные собственные значения

$$\tilde{\lambda}_j = 2 + \theta_j, \quad \tilde{\lambda}_1 < \tilde{\lambda}_2 < \dots < \tilde{\lambda}_N.$$

Ортонормальные собственные векторы E_j удовлетворяют условиям "симметрии" (0.1), если первые компоненты $E_j(1) = c_j$ определяются соотношением

$$c_j^2 = \frac{\omega_j^{-1}}{\omega_1^{-1} + \omega_2^{-1} + \dots + \omega_N^{-1}}, \quad (1.3)$$

где $\omega_j = (\theta_j - \theta_1) \dots (\theta_j - \theta_{j-1}) (\theta_{j+1} - \theta_j) \dots (\theta_N - \theta_j)$.

2. Численный алгоритм

Ниже представлен алгоритм вычисления симметричной трёхдиагональной матрицы \tilde{D} с заданными собственными значениями $\tilde{\lambda}_j$ и первыми компонентами $c_j = E_j(1)$ ортонормальных собственных векторов E_j . В случае **Задачи 1**, c_j заданы. В случае **Задачи 2**, c_j вычисляются по (1.3). Элементы матрицы

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} 2 + x_1 & -1 + u_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 + u_1 & 2 + x_2 & -1 + u_2 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & -1 + u_{i-1} & 2 + x_i & -1 + u_i & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 + u_{N-1} & 2 + x_N \end{bmatrix}$$

определяются следующими соотношениями

$$x_1 = \sum_{j=1}^N \theta_j c_j^2, \quad (2.1)$$

$$1 - u_1 = \sqrt{\sum_{j=1}^N c_j^2 (x_1 - \theta_j)^2}, \quad (2.2)$$

$$\tilde{E}_j(2) = c_j \frac{x_1 - \theta_j}{1 - u_1}, \quad j = 1, \dots, N \quad (2.3)$$

$$\hat{E}_j(2) = \tilde{E}_j(2) - \left(\sum_{\xi=1}^N \tilde{E}_\xi(2) c_\xi \right) c_j, \quad (2.4)$$

$$E_j(2) = \frac{\hat{E}_j(2)}{\sqrt{\sum_{\xi=1}^N \hat{E}_\xi^2(2)}}. \quad (2.5)$$

Остальные элементы вычисляются по рекуррентным формулам

$$x_i = \sum_{\xi=1}^N \theta_\xi (E_\xi(i))^2, \quad (2.6)$$

$$1 - u_i = \sqrt{\sum_{\xi=1}^N [(x_i - \theta_\xi) E_\xi(i) - (1 - u_{i-1}) E_\xi(i-1)]^2}, \quad (2.7)$$

$$\tilde{E}_j(i+1) = \frac{[(x_i - \theta_j) E_j(i) - (1 - u_{i-1}) E_j(i-1)]}{(1 - u_i)}, \quad (2.8)$$

$$\hat{E}_j(i+1) = \tilde{E}_j(i+1) - \sum_{\xi=1}^i \tilde{E}_j(\xi) \sum_{s=1}^N E_s(\xi) \hat{E}_s(i+1), \quad (2.9)$$

$$E_j(i+1) = \frac{\hat{E}_j(i+1)}{\sqrt{\sum_{\xi=1}^N (\hat{E}_\xi(i+1))^2}}. \quad (2.10)$$

Здесь $i = 2, \dots, N-1$ и $j = 1, \dots, N$. Недостающее x_N также вычисляется по (2.6) (с $i = N$).

Чтобы "убить" вычислительные ошибки, я корректирую \tilde{E}_j (последовательно вычисляемые в процессе счёта собственные векторы) по (2.4), (2.5), (2.9), (2.10).

Формулы (2.1)-(2.3) являются простым следствием "симметрии" и ортонормальности. Вспомним, что

$$\tilde{D} = T \tilde{\Lambda} T^*, \quad \Lambda = \text{diag}(\tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_N),$$

$$T = [E_1, \dots, E_N], \quad \tilde{\lambda}_j = 2 + \theta_j.$$

Ортонормальность столбцов T влечёт [2] ортонормальность строк T . Заданные c_j составляют первую строку T и первый столбец обратной матрицы T^* . Отсюда без труда получаем формулу (2.1)

$$x_1 = \sum_{j=1}^N \theta_j c_j^2.$$

По определению, справедливо соотношение

$$(2 + x_1) E_j(1) + (-1 + u_1) E_j(2) = \lambda_j E_j(1),$$

которое эквивалентно

$$(x_1 - \theta_j) c_j = (1 - u_1) E_j(2), \quad 1 \leq j \leq N. \quad (2.11)$$

После возведения в квадрат и суммирования по j от 1 до N получаем

$$(1 - u_1)^2 = \sum_{j=1}^N c_j^2 (x_1 - \theta_j)^2.$$

Формула (2.2) доказана, из неё очевидным образом следует (2.3). Формулы (2.6)-(2.8) доказываются аналогично. После $(i-1)$ -го шага рекурсии имеем

$$x_1, \dots, x_{i-1}; \quad u_1, \dots, u_{i-1}; \quad E_j(1), \dots, E_j(i),$$

с $j = 1, \dots, N$. На i -м шаге вычисляются

$$x_i = \sum_{j=1}^N \theta_j E_j^2(i).$$

Затем используются

$$(-1 + u_{i-1}) E_j(i-1) + (2 + x_i) E_j(i) + (-1 + u_i) E_j(i+1) = \lambda_j E_j(i), \quad 1 \leq j \leq N,$$

что эквивалентно

$$(-1 + u_{i-1}) E_j(i-1) + (x_i - \theta_j) E_j(i) = (1 - u_i) E_j(i+1), \quad 1 \leq j \leq N. \quad (2.12)$$

После возведения в квадрат и последующего суммирования по j получаем

$$(1 - u_i)^2 = \sum_{j=1}^N [(x_i - \theta_j)E_j(i) - (1 - u_{i-1})E_j(i-1)]^2.$$

Что доказывает (2.7). Формула (2.8) является очевидным следствием (2.12). После $(N-1)$ -го шага остаётся вычислить

$$x_N = \sum_{j=1}^N \theta_j E_j^2(N).$$

Заметим, что $E_j(N)$, $j = 1, \dots, N$ были найдены на предыдущем $(N-1)$ -м шаге.

Формулы (2.1)–(2.3), (2.6)–(2.8) были использованы [4] при численном исследовании перестройки спектров в дискретной квантовой механике. Чтобы проверить полученные численные результаты, я следила за ортонормальностью вычисленных собственных векторов E_j . Результаты были достаточно хорошими для $N \leq 50$. Ортонормальность и “симметрия” (0.1) ухудшаются с ростом N . Дополнительная “насильственная” полная ортогонализация (2.4), (2.5), (2.9), (2.10) спасает ситуацию. Это будет продемонстрировано в параграфе 3 на ряде численных примеров.

Н.С.Бахвалов привлёк моё внимание к возможности приложения рассматриваемого здесь численного алгоритма. Например, при обработке данных для сжатия информации используются [5] несколько первых коэффициентов разложения табличных функций $f(t_k)$, $k = 1, \dots, N$ по системе дискретных ортогональных многочленов $P_n(t_k)$ с произвольным весом:

$$\sum_{k=1}^N p_k P_n(t_k) P_m(t_k) = \delta_{n,m}.$$

Здесь $\delta_{n,m}$ — символ Кронекера, p_k — положительные числа. Предложенный в этой работе алгоритм решает проблему вычисления системы дискретных ортогональных многочленов с заданными

узлами t_k и произвольным весом $\{p_k\}$. Далее я показываю, как эта задача сводится к рассмотренной выше обратной задаче 1. Пусть \tilde{D} — решение обратной задачи 1 с заданными собственными значениями $\lambda_j = t_j$ (t_j — узлы) и заданными постоянными первыми компонентами ортонормальных собственных векторов

$$E_j(1) = 1/\sqrt{N}.$$

В процессе решения я вычислила (по (2.1)–(2.10)) ортонормальный базис собственных векторов E_j :

$$\tilde{D}E_j = \lambda_j E_j, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.13)$$

$$\sum_{\xi=1}^N E_i(\xi)E_j(\xi) = \delta_{ij}, \quad 1 \leq i, j \leq N. \quad (2.14)$$

Рассмотрим матрицу $P = \text{diag}(p_1, \dots, p_N)$ и векторы $Z_j = \sqrt{P^{-1}}E_j$. Используя (2.13), получаем

$$AZ_j = \sqrt{P^{-1}}\tilde{D}\sqrt{P}Z_j = \lambda_j Z_j, \quad j = 1, \dots, N.$$

Заметим, что A — трёхдиагональная матрица

$$A = \begin{bmatrix} (2+x_1) & \sqrt{\frac{p_2}{p_1}}(-1+u_1) & 0 & \dots & 0 \\ \sqrt{\frac{p_1}{p_2}}(-1+u_1) & (2+x_2) & \sqrt{\frac{p_3}{p_2}}(-1+u_2) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \sqrt{\frac{p_N}{p_{N-1}}}(-1+u_{N-1}) \\ 0 & 0 & 0 & \dots & (2+x_N) \end{bmatrix}$$

Элементы A определяются

$$a_{i,i-1} = \sqrt{\frac{p_{i-1}}{p_i}}(-1+u_{i-1}), \quad i = 2, \dots, N;$$

$$a_{ii} = 2+x_i, \quad i = 1, \dots, N;$$

$$a_{i,i+1} = \sqrt{\frac{p_{i+1}}{p_i}}(-1+u_i), \quad i = 1, \dots, N-1;$$

$$a_{ij} = 0 \quad \text{для } |i - j| \geq 2, \quad 1 \leq i, j \leq N.$$

После подстановки $E_j(\xi) = \sqrt{p_\xi} Z_j(\xi)$ в (2.14) имеем

$$\sum_{\xi=1}^N p_\xi Z_i(\xi) Z_j(\xi) = \delta_{ij}, \quad 1 \leq i, j \leq N.$$

Следовательно, $P_j(t_k) = Z_j(k)$ дают искомую систему дискретных ортогональных многочленов с произвольным весом $\{p_k\}$.

3. Численные примеры

Пример 1 (Возмущение констант нормализации).

Ищем симметричную трёхдиагональную матрицу \tilde{D} с исходными собственными значениями

$$\lambda_j = 2 - 2 \cos \left(\frac{j\pi}{(N+1)} \right). \quad (3.1)$$

Первые компоненты двух первых ортонормальных собственных векторов возмущены:

$$\tilde{E}_1^2(1) = E_1^2(1) - \delta, \quad \tilde{E}_2^2(1) = E_2^2(1) + \delta,$$

$$\delta = (E_2^2(1) - E_1^2(1))/4.$$

Вспомним, что первые компоненты исходной матрицы D

$$E_j(1) = \sin \left(\frac{j\pi}{N+1} \right) / \sqrt{\frac{(N+1)}{2}}.$$

Используя формулы (2.1)–(2.3), (2.6)–(2.8), вычисляем \tilde{D} . Дополнительная “насильственная” ортонормализация здесь не нужна. Положим

$$\text{enmax} = \max_{1 \leq i, j \leq N} |(E_i, E_j) - \delta_{ij}|.$$

Результаты проверки ортонормальности вычисленных (на РС/АТ-386) собственных векторов показывают превосходные результаты:

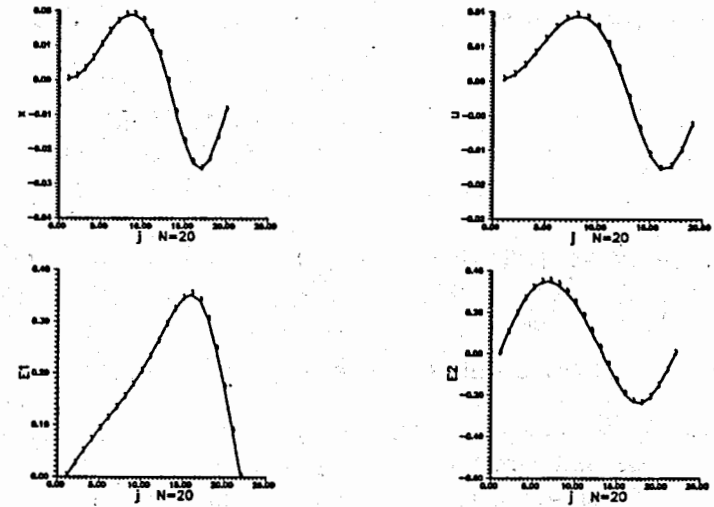


Рис. 1.(N=20)

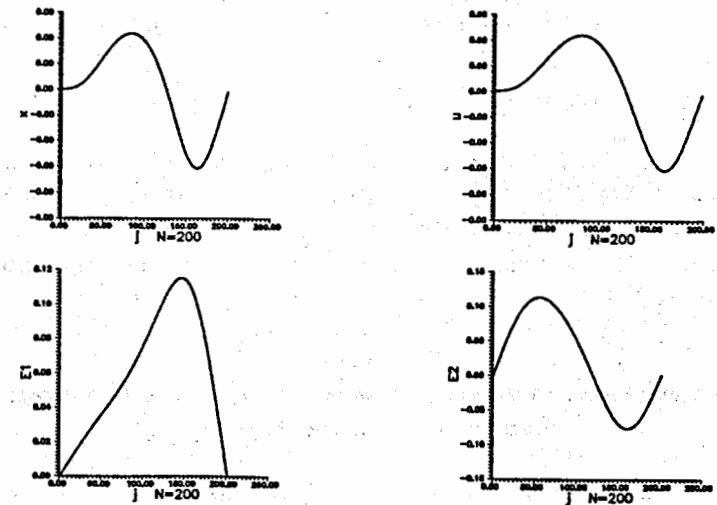


Рис. 2.(N=200)

Таблица 3.1

Порядки матриц и максимумы нарушения ортонормальности.

N=	20	enmax=	7.5015948314272056E-16
N=	50	enmax=	1.6391510544722099E-15
N=	100	enmax=	5.8120825860430440E-15
N=	200	enmax=	1.4851509778923688E-14

Ниже приводятся графики $x(j)$, $u(j)$ и двух первых собственных векторов $E_1(j)$, $E_2(j)$ (см. Рис. 1. для $N=20$ и Рис. 2 для $N=200$). Здесь и далее $x(j) = x_j$ и $u(j) = u_j$.

Пример 2 (Возмущение уровней энергии.)

Ищем симметричную трёхдиагональную матрицу с заданными собственными значениями $\tilde{\lambda}_j : \tilde{\lambda}_1 = \lambda_1 + (\lambda_2 - \lambda_1)/2$, $\tilde{\lambda}_j$ для остальных j задаются (3.1). Дополнительно требуется, чтобы ортонормальные собственные векторы удовлетворяли условиям "симметрии":

$$E_j(1) = (-1)^{j-1} E_j(N). \quad (3.2)$$

Распечатываются enmax и es1, es2, которые определяются

$$es1 = \max_{1 \leq j \leq N} |E_1(j) - E_1(N - j + 1)|,$$

$$es2 = \max_{1 \leq j \leq N} |E_2(j) + E_2(N - j + 1)|.$$

Так что es1, es2 дают "ошибки симметрии" для двух первых собственных векторов. Результаты, полученные по (2.1)–(2.3), (2.6)–(2.8) (без какой-либо дополнительной "насильственной" ортогонализации) показывают прекрасную ортонормальность и "симметрию".

Таблица 3.2

Максимум нарушения ортонормальности, максимум нарушения "симметрии", максимум $|x_j|$.

N=	20	enmax=	6.5236444718452803E-16	xmax	9.0456808371302235E-16
		esm1=	4.8572257327350599E-17	esm2=	1.1102230246251565E-16

N=	50	enmax=	2.5240226575462543E-15	xmax	1.9201978833903873E-15
		esm1=	6.8521577301083875E-16	esm2=	9.0205620750793969E-16
N=	100	enmax=	3.8230052804011374E-15	xmax	3.1954347051926045E-15
		esm1=	1.0408340855860843E-17	esm2=	6.7307270867900108E-16
N=	200	enmax=	1.5676912892836903E-14	xmax	6.6932397105881805E-15
		esm1=	2.7718712741764408E-15	esm2=	1.3747683547116196E-16

Как и выше, представлены графики $x(j)$, $u(j)$, $E_1(j)$, $E_2(j)$ на Рис. 3 и 4.

Пример 3 (Равноотстоящие энергетические уровни.)

Ищем симметричную трёхдиагональную матрицу с собственными значениями

$$\tilde{\lambda}_j = \lambda_1 + (j-1) \frac{(\lambda_N - \lambda_1)}{(N-1)}, \quad j = 1, \dots, N,$$

где λ_j определяются (3.1). Требуется, чтобы ортонормальные собственные векторы удовлетворяли условиям "симметрии" (3.2). На этот раз нужна дополнительная полная "насильственная" ортонормализация. При счёте без какой-либо дополнительной ортонормализации получаем следующее.

Таблица 3.3

N=	20	enmax=	3.1621667979749216E-15	xmax	0.1559387356880849
		esm1=	0.3087430113077814	esm2=	0.4616268265659684
N=	50	enmax=	4.2792281235173890E-11	xmax	7.0418072221261383E-02
		esm1=	0.2916510668936704	esm2=	0.4241924784642960
N=	100	enmax=	3.6725916044706330E-04	xmax	4.0609618248877348E-02
		esm1=	0.2718242820859617	esm2=	0.3823411633050627
N=	200	enmax=	0.9999967191209384	xmax	0.8629683035843630
		esm1=	0.4761484020636860	esm2=	0.6324410812865092

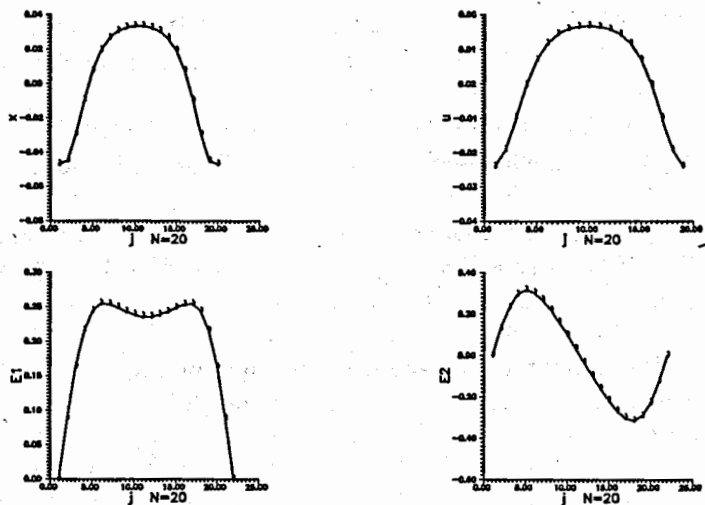


Рис. 3.(N=20)

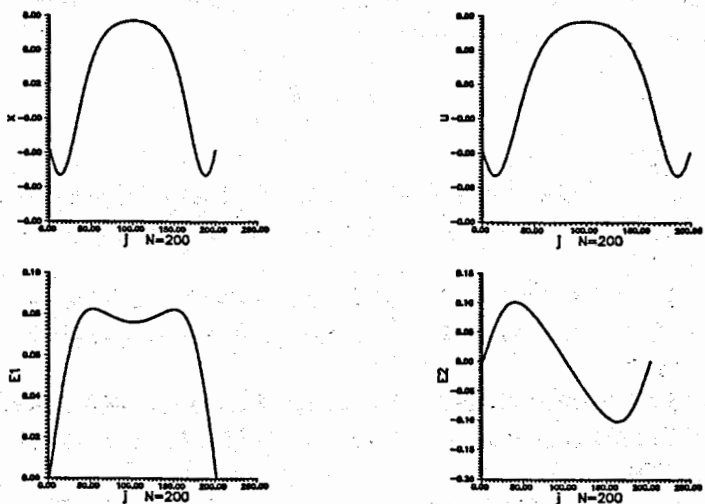


Рис. 4.(N=200)

Вы видите прекрасные результаты для $N = 20$, достаточно хорошие результаты для $N = 50$. Но для $N = 100$ "симметрия" уже не столь хорошая. В случае же $N = 200$ нет ни "симметрии", ни "ортонормальности".

Далее демонстрируются результаты расчётов по (2.1)–(2.10) (полная дополнительная "наильственная" ортогонализация). На этот раз вы можете видеть прекрасные "симметрию" и ортонормальность для $N=20,50,100,200$. См. Таблицу 3.4, Рис.5 и Рис.6: Не пугайтесь хаоса на графиках $x(j)$: $x = O(10^{-16})$ для $N=20$ и $x = O(10^{-12})$ для $N=200$. Значения $x_{\max} = \max_{1 \leq j \leq N} |x(j)|$ приведены в Таблице 3.4. Заметим, что в рассматриваемом случае аналитические значения x_j нулевые.

Таблица 3.4

N=	20	enmax=	1.1644331332494317E-16	xmax	7.2412169034412334E-16
		esm1=	2.7755575615628914E-16	esm2=	2.7755575615628914E-16
N=	50	enmax=	1.1857106008844597E-16	xmax	1.5232188725913755E-15
		esm1=	3.3306690738754696E-16	esm2=	7.7021722333370242E-16
N=	100	enmax=	1.8735013540549517E-16	xmax	1.5318150393961449E-15
		esm1=	8.8817841970012523E-16	esm2=	1.9428902930940239E-15
N=	200	enmax=	2.6899055899365365E-16	xmax	1.7124295688050738E-15
		esm1=	9.8532293435482643E-16	esm2=	1.6757428777935955E-15

Этот пример мне предложил Н.С.Бахвалов. Он сказал, что обычно проводится частичная "наильственная" ортогонализация (только с двумя предшествующими строками!). Я показываю (см. Таб.3.5), что при этом получается.

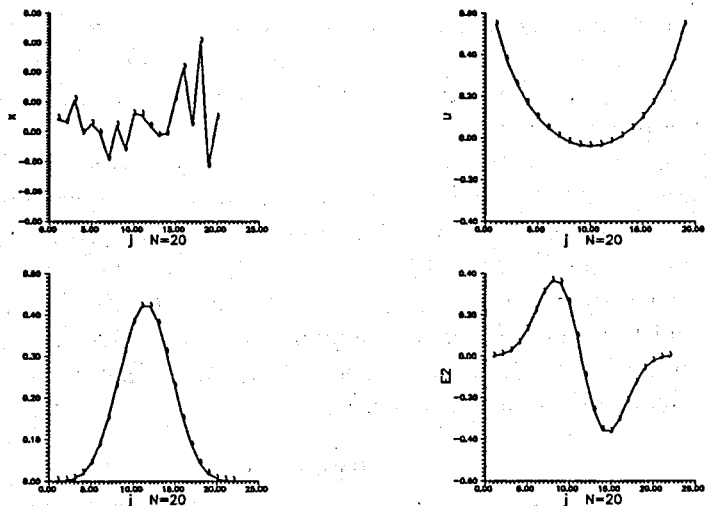


Рис. 5.(N=20)

Таблица 3.5

*Частичная "наильственная" ортогонализация.
 Максимум нарушения ортонормальности, максимум нарушения
 "симметрии", максимум $|x(j)|$.*

N=	20	enmax=	3.0761764366861392E-15	xmax	6.8563590135267688E-16
		esm1=	7.3038363551658497E-15	esm2=	2.5821358939914775E-15
N=	50	enmax=	4.8908695679944377E-11	xmax	1.2867175857786406E-15
		esm1=	4.9295537892385380E-11	esm2=	3.9329411968708228E-11
N=	100	enmax=	2.4126969930455990E-03	xmax	1.1722079751832560E-04
		esm1=	8.5490868398637071E-03	esm2=	5.2387140356419357E-04
N=	200	enmax=	0.9999997781044749	xmax	0.7596242727235722
		esm1=	0.7011994196937088	esm2=	0.645386834453496

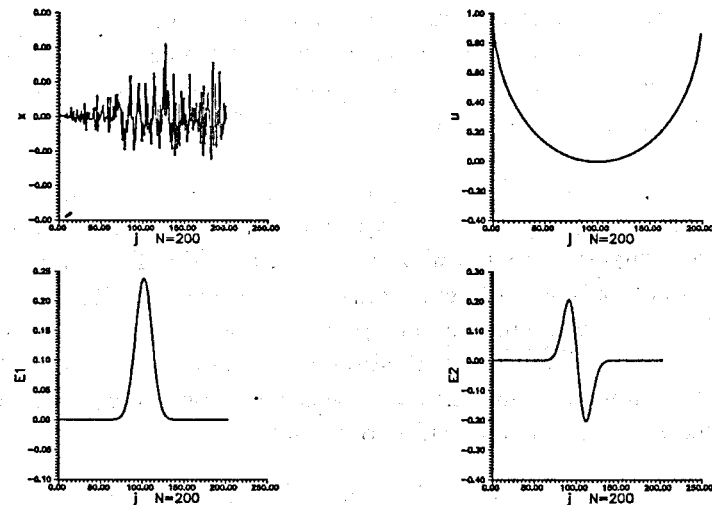


Рис. 6.(N=200)

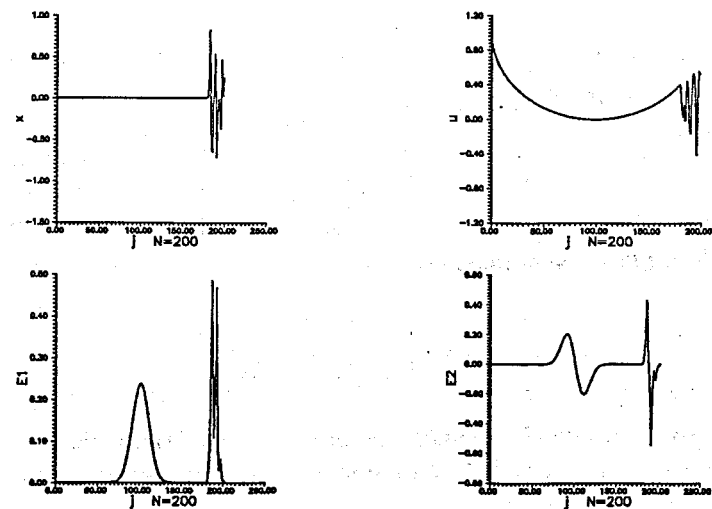


Рис. 7.(N=200)

Результаты практически те же, что и в случае счёта без какой-либо дополнительной ортогонализации. Вы видите хорошие результаты для $N = 20$, достаточно хорошие результаты для $N = 50$, не такие хорошие результаты для $N = 100$ и плохие результаты для $N = 200$.

Для сравнения на Рис. 7 (см. стр. 17) представлены графики $x(j)$, $u(j)$, $E_1(j)$, $E_2(j)$, вычисленных без какой-либо дополнительной "наильственной" ортонормализации. Вы видите сильные искажения на всех графиках (в концах). Чтобы проверить качество численного алгоритма с дополнительной полной "наильственной" ортогонализацией, я вычисляю λ_j^v — собственные значения найденной симметричной трёхдиагональной матрицы. Имеем прекрасный результат:

$$\max_{1 \leq j \leq N} |\tilde{\lambda}_j - \lambda_j^v| = O(10^{-15}), \quad N = 200.$$

Небольшая трудность возникает при вычислении

$$c_j^2 = \frac{\omega_j^{-1}}{\omega_1^{-1} + \dots + \omega_N^{-1}},$$

$$\omega_j = (\theta_j - \theta_1) \dots (\theta_j - \theta_{j-1})(\theta_{j+1} - \theta_j) \dots (\theta_N - \theta_j).$$

Для $N \leq 100$ я заменяю ω_j на

$$\Delta_j = \exp \left[\sum_{1 \leq i \neq j \leq j} \ln |i - j| \right]. \quad (3.3)$$

Для $N = 200$ используется

$$\Delta_j = \exp \left[\sum_{1 \leq i \neq j \leq j} \ln \frac{|i - j|}{10} \right].$$

В противном случае (при вычислении Δ_j по (3.3)) численные значения $E_1(j) = 0$, $1 \leq j \leq N$ равны нулю (с машинной точностью).

Пример 4 (Большая щель в энергетических уровнях.)

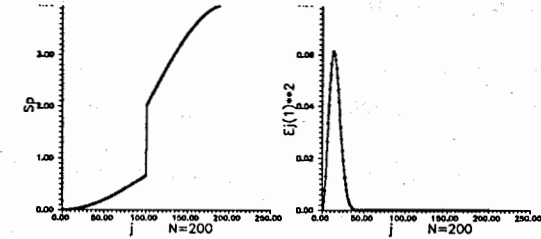


Рис. 8.

Спектр и квадраты первых компонент.

Ищем симметричную трёхдиагональную матрицу с заданными

$$\tilde{\lambda}_j = \lambda_1 + \frac{(\lambda_j - \lambda_1)}{3}, \quad 1 \leq j \leq \frac{N}{2},$$

$$\tilde{\lambda}_j = \lambda_j, \quad \frac{N}{2} + 1 \leq j \leq N,$$

где λ_j определяются (3.1).

Дополнительно требуется, чтобы ортонормальные собственные векторы удовлетворяли условию "симметрии" (3.2). Снова получаются прекрасные результаты при счёте по формулам (2.1)–(2.10) (с дополнительной полной ортогонализацией):

Таблица 3.6

"Полная наильственная" ортогонализация.

Максимум нарушения ортонормальности, максимум нарушения "симметрии", максимум $|x(j)|$.

N=	20	enmax=	1.9504797083014226E-16	xmax	1.833564145163174
		esm1=	1.5265566588595902E-15	esm2=	1.9012569296705804E-15
N=	50				

$en_{max} = 1.6425662913155393E-16$ $x_{max} = 1.920788282589207$
 $esm1 = 1.5681900222830335E-15$ $esm2 = 1.5543122344752192E-15$
 $N = 100$
 $en_{max} = 3.4792047715059838E-16$ $x_{max} = 1.957140624357620$
 $esm1 = 1.6889267762110194E-14$ $esm2 = 1.7395807017095422E-14$
 $N = 200$
 $en_{max} = 4.4229688813367255E-16$ $x_{max} = 1.977581417677064$
 $esm1 = 8.9095397726168809E-15$ $esm2 = 2.1982415887578102E-14$

Как обычно, представлены графики $x(j), u(j), E_1(j), E_2(j)$ для $N = 20$ и $N = 200$ (см. Рис. 9 и Рис. 10).

В расчётах по (2.1)–(2.3), (2.6)–(2.8) (без какой-либо дополнительной “наильственной” ортогонализации) хорошие результаты получаются только для небольших N :

Таблица 3.7

$N = 20$
 $en_{max} = 1.0985961845230230E-14$ $x_{max} = 1.854853366426251$
 $esm1 = 3.6637359812630166E-15$ $esm2 = 2.5188184871183240E-15$
 $N = 50$
 $en_{max} = 7.5221699824222039E-10$ $x_{max} = 1.925586206348601$
 $esm1 = 3.3029134982598405E-14$ $esm2 = 2.0438511993958740E-14$
 $N = 100$
 $en_{max} = 0.5022144927193430$ $x_{max} = 1.958403209071743$
 $esm1 = 5.2676411928199371E-02$ $esm2 = 7.5398801063645324E-02$
 $N = 200$
 $en_{max} = 0.9996234556096539$ $x_{max} = 1.977892515188262$
 $esm1 = 4.8029896365610272E-02$ $esm2 = 6.8731861775997594E-02$

На Рис. 11 представлены графики $x(j), u(j), E_1(j), E_2(j)$ для $N = 200$, полученные без какой-либо дополнительной “наильственной” ортогонализации.

Хорошо видно нарушение “симметрии” в приграничных интервалах.

Вычислив собственные значения найденной матрицы, я вижу прекрасные результаты (практически совпадение с машинной точ-

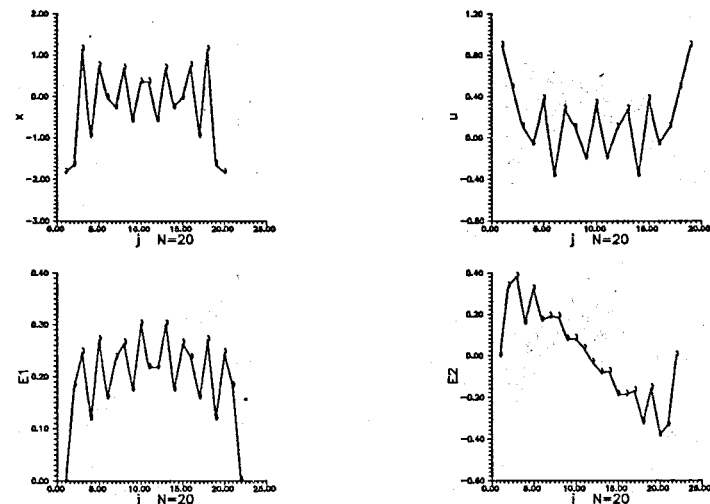


Рис. 9. (N=20)

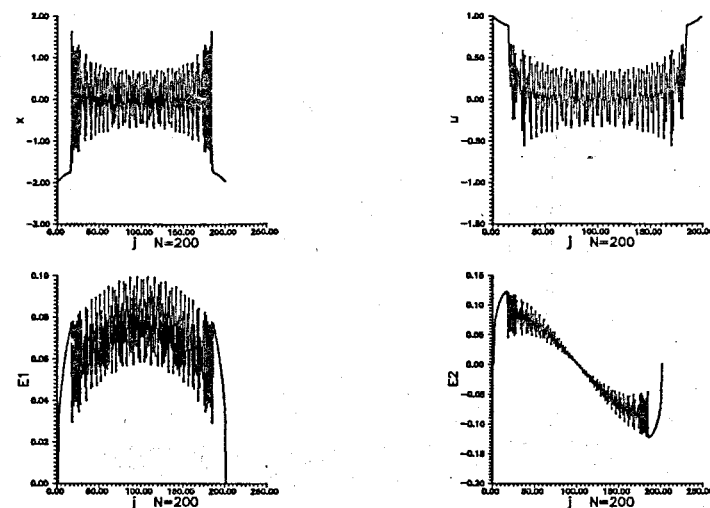


Рис. 10. (N=200)

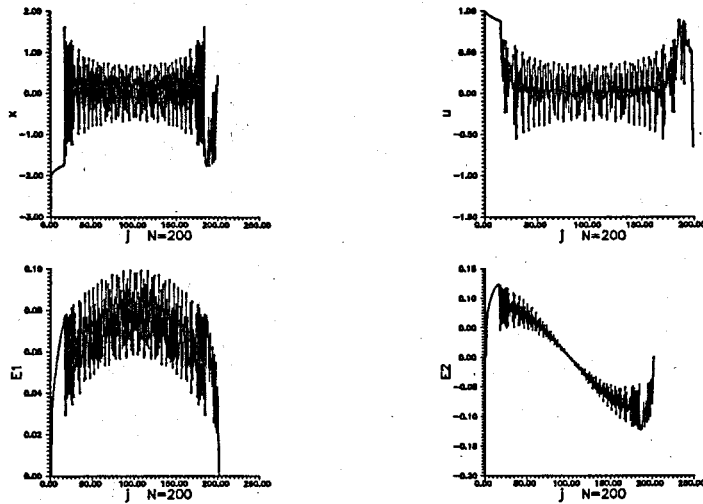


Рис. 11.(N=200)

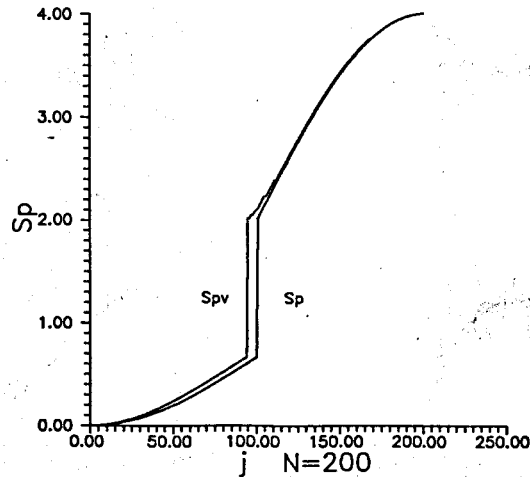


Рис. 12.(N=200)

ностью) в случае расчётов с дополнительной “наильственной” ортогонализацией:

$$\max_{1 \leq j \leq N} |\tilde{\lambda}_j - \lambda_j^v| = O(10^{-15}).$$

В расчётах без какой-либо дополнительной “наильственной” ортогонализации наблюдается сильное искажение в середине спектра (см. Таблицу 3.8 и Рис. 12).

Таблица 3.8

```
dsmax 1.437333651692373  ismax= 100
sp(imax)= 0.6616196390442068  spv(imax)= 2.098953290736580
```

Здесь $dsmax = \max_{1 \leq j \leq 200} |\tilde{\lambda}_j - \lambda_j^v| = |\tilde{\lambda}_{100} - \lambda_{100}^v|$.

Расчёты по (2.1)–(2.3), (2.6)–(2.8) с частичной “наильственной” ортогонализацией дают практически те же результаты, что и расчёты без какой-либо дополнительной ортогонализации.

Таблица 3.9

Частичная “наильственная” ортогонализация.

```
N= 20
enmax= 3.2651832626573450E-15  xmax 1.854853366426251
esm1= 2.2204460492503131E-15  esm2= 1.8804402479588590E-15
N= 50
enmax= 1.0744957849370129E-10  xmax 1.925586206348601
esm1= 1.3378187446733136E-14  esm2= 1.1702444568939540E-14
N= 100
enmax= 2.4653105795070465E-02  xmax 1.958403209071743
esm1= 5.1158635616362076E-04  esm2= 7.3198971207674714E-04
N= 200
enmax= 0.9999825719259018  xmax 1.977892515188262
esm1= 4.7292711314442979E-02  esm2= 6.5231687732418618E-02
```

Проблема накопления ошибок в вычислениях по алгоритмам рассматриваемого вида изучается в [1].

Заключение. Рассмотренные численные примеры показывают, что метод Ланцоша с дополнительной полной "насильственной" ортогонализацией (2.1)-(2.10) даёт прекрасное численное решение обратных Задач 1,2 для симметричных трёхдиагональных матриц (включая матрицы высокого порядка).

Приношу глубокую благодарность академику Н.С.Бахвалову за полезные обсуждения и за интересный Пример 3. Приношу благодарность доктору Б.Н.Захарьеву за сотрудничество и моим коллегам Р.С.Егикяну, Г.С.Казаче, Т.А.Стриж, В.С.Степаненко, которые помогли мне освоить РС.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н.С.Бахвалов. *Численные методы*. М.: Наука, 1973
2. Ф.Р.Гантмахер. *Теория матриц*. М.: Наука, 1967.
3. А.О.Гельфонд. *Исчисление конечных разностей*. М.:Наука, 1967.
4. Б.Н.Захарьев, С.И.Сердюкова. *Перестройка спектров в дискретной квантовой механике*. Препринт ОИЯИ, P4-92-10, Дубна, 1992, (будет опубликовано в Phys.Rev.A).
5. А.Ф.Никифоров, С.К.Суслов, В.Б.Уваров. *Классические ортогональные полиномы дискретной переменной*. М.:Наука, 1985.
6. В.Парлетт. *Симметричная проблема собственных значений*. М.:Мир, 1983.
7. S.I.Serdyukova, B.N.Zakhariev. *Why the Quantum Wave on the Lattice doesn't Slide Down the Potential Slope*. Preprint of JINR, E4-91-237, Dubna, 1991 (будет опубликовано в Phys.Rev.A).

Рукопись поступила в издательский отдел
26 октября 1992 года.

Сердюкова С.И.

P11-92-434

Обратная задача для симметричных трёхдиагональных матриц. Вычисление системы дискретных ортогональных многочленов с произвольным весом

Исследуются численные методы построения симметричных трёхдиагональных матриц с заданными различными собственными значениями. Кроме того, задаются первые компоненты ортонормальных собственных векторов или условия "симметрии". Доказана формула для собственных векторов. На ряде численных примеров показано, что метод Ланцоша с дополнительной полной ортогонализацией даёт прекрасные результаты даже для матриц высокого порядка. Без дополнительной полной ортогонализации хорошие результаты получаются лишь для матриц невысокого порядка. Предложен алгоритм вычисления системы дискретных ортогональных многочленов с произвольным весом.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Перевод автора

Serdyukova S.I.

P11-92-434

Inverse Problem for Symmetric Tridiagonal Matrices. Calculation of Discrete Orthogonal Polynomial System with Arbitrary Weight

Numerical methods for reconstruction of symmetric tridiagonal matrices with given eigenvalues are studied. In addition the first components of orthonormal eigenvectors or "symmetry" conditions are given. An analytic formula for eigenvectors is proved. A number of numerical examples show, that the Lanczos method with additional complete "forced" orthonormalization gives perfect results even for high order matrices. Without additional complete "forced" orthonormalization, good results are obtained for low order matrices only. An algorithm for calculation of discrete orthogonal polynomial system with arbitrary weight is proposed.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1992