

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

96-89

P5-96-89

С.И.Сердюкова

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА
ДЛЯ ДИСКРЕТНОЙ СИСТЕМЫ ДИРАКА

Направлено в «Журнал высшей математики и математической физики»

1996

В этой работе обсуждается численное решение обратной задачи для одномерной дискретной системы Дирака [1]:

$$y_0 = -\sin \alpha, \quad (0.1)$$

$$x_{-1} = \cos \alpha, \quad (0.2)$$

$$\frac{(y_{\nu+1} - y_{\nu})}{h} - (\lambda + p_{\nu})x_{\nu} = 0, \quad (0.3)$$

$$\frac{(x_{\nu} - x_{\nu-1})}{h} + (\lambda + q_{\nu})y_{\nu} = 0, \quad (0.4)$$

$$\nu = 0, 2, \dots, n-1;$$

$$y_n \cos \beta + x_{n-1} \sin \beta = 0. \quad (0.5)$$

Из условий (0.1), (0.2) и (0.5) следуют

$$x_{-1} = -y_0 \operatorname{ctg} \alpha, \quad (0.6)$$

$$x_{n-1} = -y_n \operatorname{ctg} \beta. \quad (0.7)$$

Рассматриваемая задача имеет $N = 2n$ различных действительных собственных значений

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N,$$

которые отвечают N ортогональных собственных векторов

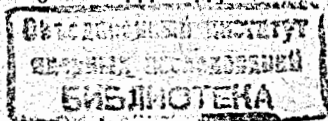
$$Z_j = [x_{-1}(\lambda_j), y_0(\lambda_j), x_0(\lambda_j), \dots, y_{n-1}(\lambda_j), x_{n-1}(\lambda_j), y_n(\lambda_j)]^*.$$

Здесь и далее звездочка * переводит вектор-строку в вектор-столбец.

$$(Z_i, Z_j) = \sum_{\nu=0}^{n-1} (x_{\nu}(\lambda_i)x_{\nu}(\lambda_j) + y_{\nu}(\lambda_i)y_{\nu}(\lambda_j)) = 0, \quad 1 \leq i \neq j \leq N.$$

Спектр рассматриваемой задачи является спектром следующей симметричной трехдиагональной матрицы:

$$D = \begin{bmatrix} -q_0 - \operatorname{ctg} \alpha & -1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ -1 & -p_0 & 1 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 1 & -q_{\nu} & -1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & 0 & -1 & -p_{\nu} & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & -1 & -p_{n-1} - \operatorname{tg} \beta \end{bmatrix}.$$



В этой работе решается следующая обратная задача: найти симметричную трехдиагональную матрицу четного порядка $N = 2n$

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} \theta_1 & -1 - u_1 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ -1 - u_1 & \theta_2 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 1 + u_{2\nu} & \theta_{2\nu+1} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & -1 - u_{2\nu+1} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 - u_{2n-1} & \theta_{2n} \end{bmatrix} \quad (0.8)$$

с заданными различными собственными значениями $\lambda_1, \dots, \lambda_N$. Дополнительно предполагается, что ортонормированный базис собственных векторов $\{E_j\}, j = 1, \dots, N$, удовлетворяет условиям "симметрии"

$$E_j(N) = (-1)^{j+n} E_j(1).$$

Предложен алгоритм (параграф 2) для одновременного вычисления такой матрицы и ее ортонормированного базиса. Удаётся вычислить первые компоненты $E_j(1)$ векторов ортонормированного базиса. Предварительно выводятся явные формулы для собственных векторов (параграф 1). После того, как $\{\theta_i\}, \{u_i\}, \{E_j\}$ вычислены, параметры возмущенной дискретной системы Дирака и ее собственные векторы находятся простым пересчетом. Согласно (0.1) $y_0 = \sin \alpha$. Отсюда имеем, что

$$[y_0, x_0, \dots, y_{n-1}, x_{n-1}]^* = -(\sin \alpha) E_j / E_j(1).$$

Из граничного условия (0.7) следует, что $y_n = -x_{n-1} \operatorname{tg} \beta$. Условия "симметрии" сохраняются после умножения на константу. Граничные компоненты x_{-1}, y_n удовлетворяют условиям "симметрии", если $\operatorname{tg} \alpha = \operatorname{ctg} \beta$.

Для случая $h \neq 1$ решаем "обратную задачу при $h = 1$ " с заданными точками спектра $h\lambda_j$. Найденные θ_ν делим на h . Возмущенная система Дирака имеет вид

$$\frac{(1 + u_{2\nu+2})y_{\nu+1} - (1 + u_{2\nu+1})y_\nu}{h} - (\lambda + p_\nu)x_\nu = 0,$$

$$\frac{(1 + u_{2\nu+1})x_\nu - (1 + u_{2\nu})x_{\nu-1}}{h} + (\lambda + q_\nu)y_\nu = 0,$$

$$\nu = 0, 2, \dots, n-1;$$

$$x_{-1} = -y_0 \operatorname{ctg} \alpha, \quad y_n = -x_{n-1} \operatorname{tg} \beta.$$

Здесь $u_0 = 0, u_N = 0$, остальные u_ν определены выше. Если θ_i - диагональные элементы построенной (при $h = 1$) матрицы, то

$$q_0 = -\frac{\theta_1 + \operatorname{ctg} \alpha}{h}, \quad p_{n-1} = -\frac{\theta_{2n} + \operatorname{tg} \beta}{h},$$

$$[p_0, q_1, \dots, q_{n-1}] = -[\theta_2, \theta_3, \dots, \theta_{2n-1}] / h.$$

В параграфе 3 приведены результаты численных расчетов для случая равноотстоящих точек спектра при $n = 20, 100, 200, 300, 500, 1000$.

Аналогичные результаты были получены в [2] для дискретного уравнения Шредингера.

1. Структура собственных векторов

Прежде всего разберёмся как устроены собственные векторы матрицы (0.8). Справедлива следующая Лемма.

Лемма 1. Если симметричная трехдиагональная матрица \tilde{D} имеет различные собственные значения

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$$

и первые компоненты ее ортонормальных собственных векторов матрицы $E_j(1) = c_j, c_j \neq 0$, тогда последние компоненты определяются формулой

$$E_j(N) = \frac{(-1)^{j+n} (1 + u_1)(1 + u_2) \dots (1 + u_{N-1})}{c_j (\lambda_j - \lambda_1) \dots (\lambda_j - \lambda_{j-1})(\lambda_{j+1} - \lambda_j) \dots (\lambda_N - \lambda_j)}. \quad (1.1)$$

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

$$E_j(2) = \frac{\theta_1 - \lambda_j}{1 + u_1} c_j,$$

$$E_j(2\nu + 1) = [P_{2\nu-1}(\lambda_j) + \frac{(-1)^\nu (-\lambda_j)^{2\nu}}{(1 + u_1) \dots (1 + u_{2\nu-1})}] c_j,$$

$$E_j(2\nu) = [P_{2\nu}(\lambda_j) + \frac{(-1)^\nu (-\lambda_j)^{2\nu+1}}{(1 + u_1) \dots (1 + u_{2\nu})}] c_j,$$

$$\nu = 1, \dots, n-1.$$

Здесь $P_l(\lambda_j)$ - полиномы порядка l . Их коэффициенты зависят от соответствующих $\theta_1, \dots, \theta_{l+1}; u_1, \dots, u_{l+1}$ (не зависят от $j!$). По предположению E_j составляют ортонормированный базис. Положим $T = [E_1, \dots, E_N]$. Известно [3], что строки матрицы T также составляют ортонормированный базис. Заметим, что $\chi_\xi = E_\xi(N)$ являются решением системы

$$T\bar{\chi} = \mathcal{E}_N, \quad \mathcal{E}_N(\xi) = \delta_{N\xi},$$

которая записывается в виде

$$\begin{bmatrix} c_1 & \dots & c_i & \dots & c_N \\ \dots & \dots & \frac{P_0 - \lambda_i}{1 + u_1} c_i & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \frac{P_{2\nu-1}(\lambda_i) + (-\lambda_i)^{2\nu} (-1)^\nu}{(1+u_1)\dots(1+u_{2\nu})} c_i & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \frac{P_{2\nu}(\lambda_i) + (-\lambda_i)^{2\nu+1} (-1)^\nu}{(1+u_1)\dots(1+u_{2\nu+1})} c_i & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \frac{P_{N-2}(\lambda_i) + (-\lambda_i)^{2n-1} (-1)^{n-1}}{(1+u_1)\dots(1+u_{2n-1})} c_i & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \\ \vdots \\ \chi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix},$$

$i = 1, \dots, N.$

Отсюда следует, что

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

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 $P_i(\chi_j)$ в Δ_N простым вычитанием из каждой строки линейной комбинации предшествующих строк с подходящими коэффициентами. Под знаком детерминанта остается матрица $\|t_{ij}\|$, $t_{ij} = (-\lambda_j)^{i-1} (-1)^\nu$. Далее из каждой строки выносим множитель $(-1)^\nu$, $\nu = [(i-1)/2]$, i — номер строки. Здесь $[k]$ — целая часть k . Так как число строк четное, $N = 2n$, после этой манипуляции значение детерминанта не изменится. Наконец, выносим множители c_j из столбцов и произведения $(1-u_1)^{-1} \dots (1-u_i)^{-1}$ из строк. Используя известную формулу для определителя Вандермонда (см., например, [4]), получаем

$$\begin{aligned} \Delta_N &= \frac{c_1 \dots c_N}{(1+u_1)^{N-1} (1+u_2)^{N-2} \dots (1+u_{N-1})} \times \\ &\times \det \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ -\lambda_1 & \dots & -\lambda_N \\ \vdots & \dots & \vdots \\ (-\lambda_1)^{N-1} & \dots & (-\lambda_N)^{N-1} \end{bmatrix} = \\ &= \frac{c_1 \dots c_N (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}}}{(1+u_1)^{N-1} (1+u_2)^{N-2} \dots (1+u_{N-1})} \prod_{1 \leq i < \xi \leq N} (\lambda_\xi - \lambda_i). \end{aligned}$$

Аналогично находим

$$\Delta_{N-1}(j) = (-1)^{n-1} \frac{c_1 \dots c_N (-1)^{\frac{N(N-1)}{2} - (N-1)}}{c_j (1+u_1)^{N-2} (1+u_3)^{N-3} \dots (1+u_{N-2})} \prod_{\substack{1 \leq i < \xi \leq N \\ i \neq j, \xi \neq j}} (\lambda_\xi - \lambda_i).$$

Матрица T_c имеет нечетный порядок $2n - 1$. Так что последняя строка не имеет пары. Так появляется множитель $(-1)^{n-1}$ в правой части последней формулы.

Отсюда следует, что

$$\chi_j = E_j(N) = \frac{(-1)^{j+n} (1+u_1)(1+u_2) \dots (1+u_{N-1})}{c_j (\lambda_j - \lambda_1) \dots (\lambda_j - \lambda_{j-1})(\lambda_{j+1} - \lambda_j) \dots (\lambda_N - \lambda_j)}.$$

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

Предложение 1. Потребуем, чтобы собственные векторы E_j удовлетворяли условиям "симметрии":

$$E_j(1) = (-1)^{j+n} E_j(N).$$

Тогда первые компоненты $E_j(1) = c_j$ определяются соотношением

$$c_j^2 = \frac{\omega_j^{-1}}{\omega_1^{-1} + \omega_2^{-1} + \dots + \omega_N^{-1}}, \quad (1.2)$$

где $\omega_j = (\lambda_j - \lambda_1) \dots (\lambda_j - \lambda_{j-1})(\lambda_{j+1} - \lambda_j) \dots (\lambda_N - \lambda_j)$.

2. Численный алгоритм

Ниже представлен алгоритм вычисления симметричной трёхдиагональной матрицы \tilde{D} с заданными собственными значениями λ_j и первыми компонентами ортонормальных собственных векторов E_j , c_j , которые вычисляются по формуле (1.2). Элементы матрицы \tilde{D} определяются следующими соотношениями:

$$\theta_1 = \sum_{j=1}^N \lambda_j c_j^2, \quad (2.1)$$

$$1 + u_1 = \sqrt{\sum_{j=1}^N c_j^2 (\theta_1 - \lambda_j)^2}, \quad (2.2)$$

$$\tilde{E}_j(2) = c_j \frac{\theta_1 - \lambda_j}{1 + u_1}, \quad j = 1, \dots, N \quad (2.3)$$

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

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

Остальные элементы вычисляются по рекуррентным формулам

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

$$1 + u_{2\nu} = \sqrt{\sum_{\xi=1}^N [(\theta_{2\nu} - \lambda_{\xi}) E_{\xi}(2\nu) - (1 + u_{2\nu-1}) E_{\xi}(2\nu - 1)]^2}, \quad (2.7)$$

$$\tilde{E}_j(2\nu + 1) = \frac{[-(\theta_{2\nu} - \lambda_j) E_j(2\nu) + (1 + u_{2\nu-1}) E_j(2\nu - 1)]}{(1 + u_{2\nu})}, \quad (2.8)$$

$$\hat{E}_j(2\nu + 1) = \tilde{E}_j(2\nu + 1) - \sum_{\xi=1}^{2\nu} \tilde{E}_j(\xi) \sum_{s=1}^N E_s(\xi) \tilde{E}_s(2\nu + 1), \quad (2.9)$$

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

Далее следуют формулы для вычисления параметров матрицы с нечетными индексами и компонент собственных векторов с четными индексами:

$$\theta_{2\nu+1} = \sum_{\xi=1}^N \lambda_{\xi} (E_{\xi}(2\nu + 1))^2, \quad (2.11)$$

$$1 + u_{2\nu+1} = \sqrt{\sum_{\xi=1}^N [(\theta_{2\nu+1} - \lambda_{\xi}) E_{\xi}(2\nu + 1) + (1 + u_{2\nu}) E_{\xi}(2\nu)]^2}, \quad (2.12)$$

$$\tilde{E}_j(2\nu + 2) = \frac{[(\theta_{2\nu+1} - \lambda_j) E_j(2\nu + 1) + (1 + u_{2\nu}) E_j(2\nu)]}{(1 + u_{2\nu+1})}, \quad (2.13)$$

$$\hat{E}_j(2\nu + 2) = \tilde{E}_j(2\nu + 2) - \sum_{\xi=1}^{2\nu+1} \tilde{E}_j(\xi) \sum_{s=1}^N E_s(\xi) \tilde{E}_s(2\nu + 2), \quad (2.14)$$

$$E_j(2\nu + 2) = \frac{\hat{E}_j(2\nu + 2)}{\sqrt{\sum_{\xi=1}^N (\hat{E}_{\xi}(2\nu + 2))^2}}. \quad (2.15)$$

Здесь $\nu = 1, \dots, n-1$ и $j = 1, \dots, N$. Недостающее θ_{2n} также вычисляется по (2.6) с $\nu = n$.

Чтобы "убить" вычислительные ошибки, мы корректируем \tilde{E}_j (последовательно вычисляемые в процессе счёта собственные векторы) по (2.4), (2.5), (2.9), (2.10), (2.14), (2.15).

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

$$\tilde{D} = T \Lambda T^*, \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N), \quad T = [E_1, \dots, E_N].$$

Ортонормальность столбцов матрицы T влечёт [3] ортонормальность её строк. Заданные c_j составляют первую строку T и первый столбец обратной матрицы T^* . Отсюда без труда получаем формулу (2.1)

$$\theta_1 = \sum_{j=1}^N \lambda_j c_j^2.$$

По определению справедливо соотношение

$$\theta_1 E_j(1) - (1 + u_1) E_j(2) = \lambda_j E_j(1),$$

которое эквивалентно

$$(\theta_1 - \lambda_j) c_j = (1 + u_1) E_j(2), \quad 1 \leq j \leq N.$$

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

$$(1 + u_1)^2 = \sum_{j=1}^N c_j^2 (\theta_1 - \lambda_j)^2.$$

Формула (2.2) доказана, из неё очевидным образом следует (2.3). Формулы (2.6)-(2.8), (2.11)-(2.13) доказываются аналогично.

В случае $\alpha = 0$, $\beta = 0$ имеем $y_0 = 0$, $y_N = 0$; $x_{-1} = x_0$. Задача сводится к вычислению симметричной трёхдиагональной матрицы нечётного порядка $N = 2n - 1$

$$\tilde{D} = \begin{bmatrix} \theta_1 & 1 + u_1 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 + u_1 & \theta_2 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & -1 - u_{2\nu} & \theta_{2\nu+1} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & 1 + u_{2\nu+1} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 - u_{2n-2} & \theta_{2n-1} \end{bmatrix}$$

по заданным различным собственным значениям $\lambda_1, \dots, \lambda_N$. Как и выше, предполагается, что собственные векторы удовлетворяют условию "симметрии"

$$E_j(N) = (-1)^{j+n} E_j(1).$$

Первые компоненты $c_j = E_j(1)$ ортонормированных собственных векторов по-прежнему определяются соотношением (1.2). Меняются знаки в расчётных формулах (2.3), (2.7), (2.8):

$$\bar{E}_j(2) = -c_j \frac{\theta_1 - \lambda_j}{1 + u_1}, \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.3')$$

$$1 + u_{2\nu} = \sqrt{\sum_{\xi=1}^N [(\theta_{2\nu} - \lambda_\xi) E_\xi(2\nu) + (1 + u_{2\nu-1}) E_\xi(2\nu - 1)]^2}, \quad (2.7')$$

$$\bar{E}_j(2\nu + 1) = \frac{[(\theta_{2\nu} - \lambda_j) E_j(2\nu) + (1 + u_{2\nu-1}) E_j(2\nu - 1)]}{(1 + u_{2\nu})}, \quad (2.8')$$

Здесь $j = 1, \dots, N$, $\nu = 1, \dots, n - 1$. Меняются также знаки в формулах (2.12), (2.13):

$$1 + u_{2\nu+1} = \sqrt{\sum_{\xi=1}^N [-(\theta_{2\nu+1} - \lambda_\xi) E_\xi(2\nu + 1) + (1 + u_{2\nu}) E_\xi(2\nu)]^2}, \quad (2.12')$$

$$\bar{E}_j(2\nu + 2) = \frac{[-(\theta_{2\nu+1} - \lambda_j) E_j(2\nu + 1) + (1 + u_{2\nu}) E_j(2\nu)]}{(1 + u_{2\nu+1})}. \quad (2.13')$$

В этом случае $\nu = 1, \dots, n - 2$. Остальные расчётные формулы те же, что и выше. Недостающее θ_N вычисляется по (2.11) с $\nu = n - 1$.

В этом случае возмущенная система имеет вид

$$\frac{(1 + u_{2\nu+1})y_{\nu+1} - (1 + u_{2\nu})y_\nu}{h} - (\lambda + p_\nu)x_\nu = 0,$$

$$\nu = 0, 1, \dots, n - 1;$$

$$\frac{(1 + u_{2\nu})x_\nu - (1 + u_{2\nu-1})x_{\nu-1}}{h} + (\lambda + q_\nu)y_\nu = 0,$$

$$\nu = 1, \dots, n - 1;$$

$$x_{-1} = x_0 = 1, \quad y_0 = y_n = 0.$$

Здесь $u_0 = 0, u_N = 0$, остальные u_ν определены выше, $p_\nu = -\theta_{2\nu+1}/h$, $q_\nu = -\theta_{2\nu}/h$, $[x_0, y_1, \dots, x_{n-1}]^* = E_j/E_j(1)$, $j = 1, \dots, N$.

3. Результаты вычислений

В этом параграфе мы приводим результаты вычислений симметричных трёхдиагональных матриц порядков $N = 20, 100, 200, 300, 500, 1000$ по заданным равноотстоящим собственным значениям $\lambda_j = j/N$, $j = 1, \dots, N$. Одновременно вычисляются ортонормированные собственные векторы, удовлетворяющие условиям "симметрии"

$$E_j(1) = (-1)^{j+n} E_j(N), \quad N = 2n.$$

На рис. 1,2 представлены графики $u(j)$ при счете с дополнительной полной ортонормализацией. На рис. 3 видны осцилляции, которые наблюдаются при счете с частичной дополнительной ортонормализацией (обычно производится ортогонализация лишь с двумя предшествующими векторами). На рис. 4-6 приведены графики первых собственных решений для $N = 20, 200$. На рис. 6 снова видны осцилляции, возникающие в случае частичной ортогонализации. Визуальная симметрия графиков на рис. 5 подтверждается числами в таблице 3.1. Вторая часть таблицы показывает, что при использовании частичной ортонормализации ошибки ортогональности и симметрии на много порядков хуже даже для $N = 100$.

Таблица 3.1

Полная ортонормализация, $N = 200$.

$$\begin{aligned} \text{enmax} &= 1.1102230246252\text{D}-15 & \text{diag} &= -0.502500000000000 \\ \text{esm1} &= 1.5473733405713\text{D}-15 & \text{esm2} &= 5.4262150328555\text{D}-15 \end{aligned}$$

Частичная ортонормализация, $N = 100$.

$$\begin{aligned} \text{enmax} &= 2.7268748973649\text{D}-03 & \text{diag} &= -0.50504333031915 \\ \text{esm1} &= 3.5413548513739\text{D}-04 & \text{esm2} &= 1.9988535782691\text{D}-03 \end{aligned}$$

Здесь enmax, esm1, esm2 - ошибки ортогональности и симметрии вычисленных собственных векторов:

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

$$\text{esm1} = \max_{1 \leq j \leq N} |E_1(j) - E_1(N - j + 1)|,$$

$$\text{esm2} = \max_{1 \leq j \leq N} |E_2(j) - E_2(N - j + 1)|.$$

Во всех проведённых расчетах (матриц с равноотстоящими собственными значениями) получались постоянные диагональные элементы θ . В таблице приведено их значение diag.

На рис. 7-10 приведены графики собственных векторов с номерами $j = 99 - 102$. При счете с полной дополнительной ортонормализацией видна идеальная симметрия графиков. При счете с частичной ортонормализацией снова наблюдается неустойчивость.

Небольшая трудность возникает при вычислении

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

$$\omega_j = (\lambda_j - \lambda_1) \dots (\lambda_j - \lambda_{j-1})(\lambda_{j+1} - \lambda_j) \dots (\lambda_N - \lambda_j).$$

Для $N \geq 100$ мы заменяем ω_j на

$$\Delta_j = \exp \left[\sum_{1 \leq i \neq j \leq N} \ln |i - j| \right]. \quad (3.1)$$

Для $N \geq 200$ используется

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

В противном случае (при вычислении Δ_j по (3.1)) численные значения $E_1(j) = 0$ равнялись нулю (с машинной точностью). Для $N = 200$ мы брали $c = 10$, найденное в [2]. В случае $N \geq 300$ константа c определяется с помощью формулы Стирлинга [5]: $c > N * \exp(-1/2 - 700/N)$. Расчеты проводились на SUN20. Использовался язык FORTRAN 77 в режиме double precision. Для $N = 300, 500, 1000$ константа c принималась равной 20, 50, 300 соответственно. Расчетное время было 2,6,30 минут соответственно для $N = 300, 500, 1000$.

В таблице 3.2 приводятся ошибки симметрии и ортогональности, а также значения диагональных элементов для $N = 300, 500, 1000$.

Таблица 3.2
Полная ортонормализация, $N = 300$.

enmax =	1.5543122344752D-15	diag =	- 0.50166666666667
esm1 =	1.4932499681208D-14	esm2 =	2.2763041451768D-14
N= 500			
enmax =	2.3314683517128D-15	diag =	- 0.50100000000000
esm1 =	5.9952043329758D-15	esm2 =	1.0352829704630D-14
N= 1000			
enmax =	2.4424906541753D-15	diag =	- 0.50050000000000
esm1 =	4.8017145815038D-15	esm2 =	1.1321672765963D-14



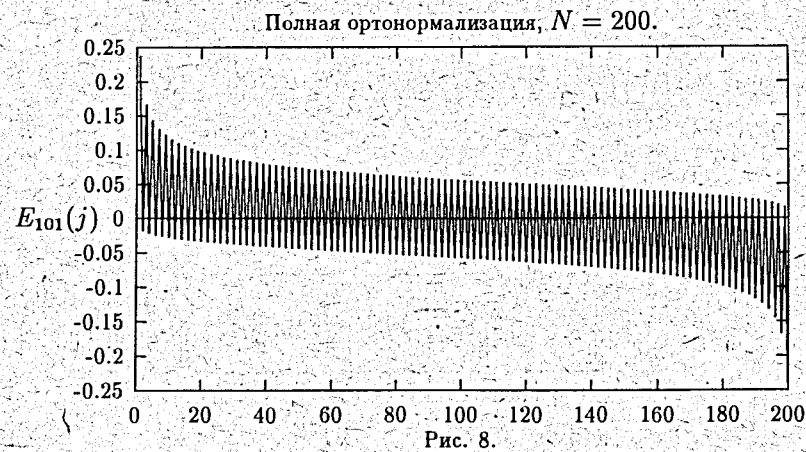
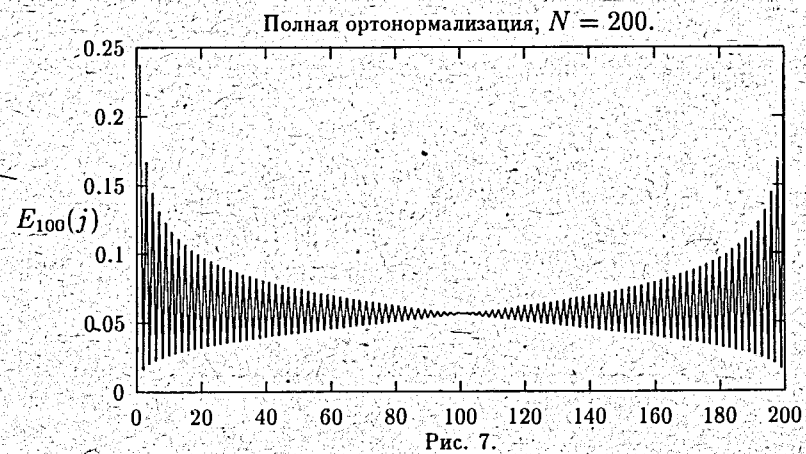
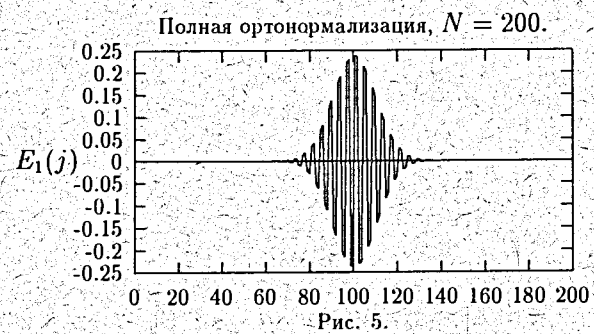
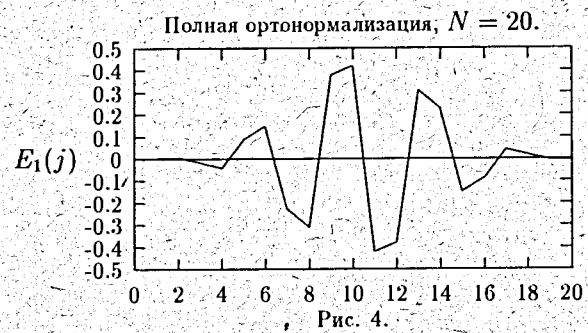
Рис. 1.

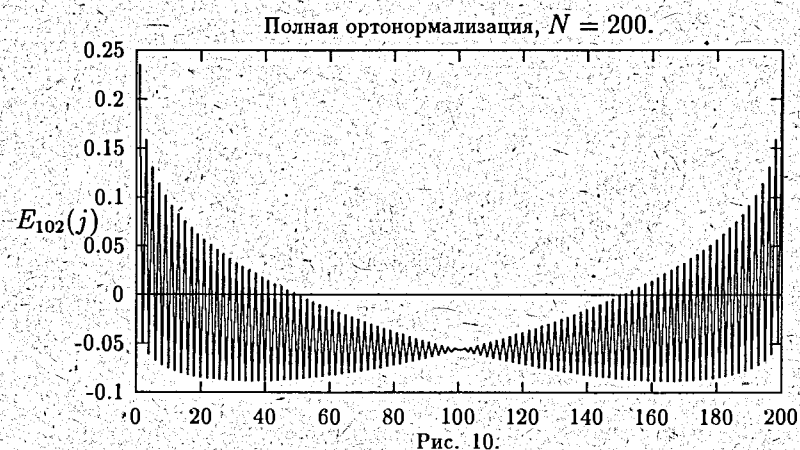
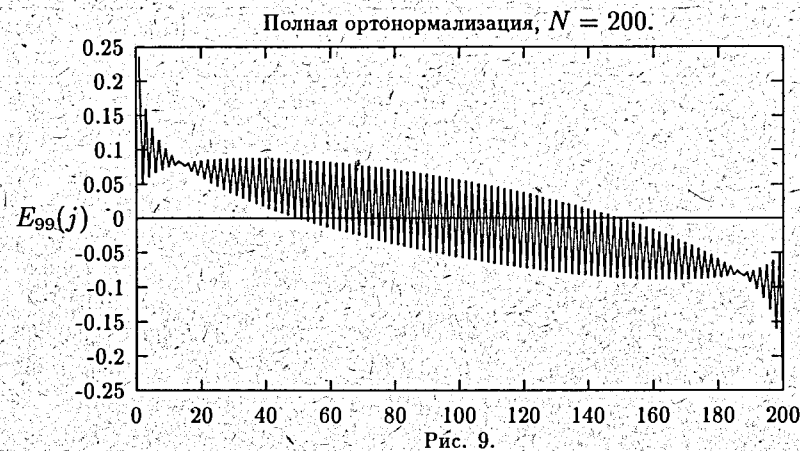


Рис. 2.



Рис. 3.





Заключение. Рассмотренные численные примеры показывают, что метод Ланцоша с дополнительной полной ортогонализацией (2.1)–(2.15) даёт хорошие результаты при вычислении (по заданному спектру и условиям "симметрии" собственных векторов) симметричных трёхдиагональных матриц, возникающих при решении обратной задачи для дискретной системы Дирака. В том числе для матриц высокого порядка ($N=1000$). При использовании частичной ортонормализации, в случае матриц порядка выше 200, наблюдаются осцилляции, существенно искажающие решение.

Приношу благодарность профессору БАН Е.Христову за постановку задачи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Б.М.Левитан, И.С.Саргсян. *Введение в спектральную теорию*. М.: Наука, 1970.
2. S.I.Serdyukova. *Inverse problem for symmetric tridiagonal matrices. Calculation of the system of discrete orthogonal polynomials with arbitrary weight*. *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*, Vol.8, No.3, pp.245-263 (1993).
3. Ф.Р.Гантмахер. *Теория матриц*. М.: Наука, 1967.
4. А.О.Гельфонд. *Исчисление конечных разностей*. М.: Наука, 1967.
5. В.Феллер. *Введение в теорию вероятностей и её приложения*. М.: "Мир", 1964.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 марта 1996 года.