КОМПЬЮТЕРНАЯ МАТЕМАТИКА

УДК 519.6

О.В. ПОПОВ

КОМП'ЮТЕРНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ДОСТОВІРНОСТІ РОЗВ'ЯЗКІВ УЗАГАЛЬНЕНОЇ АЛГЕБРАЇЧНОЇ ПРОБЛЕМИ ВЛАСНИХ ЗНАЧЕНЬ

Розглядається узагальнена алгебраїчна проблема власних значень з симетричними матрицями. Отримано оцінки похибок власних значень і власних векторів узагальненої проблеми з симетричними матрицями, одна з яких додатно визначена. Досліджено достовірність розв'язків часткової узагальненої проблеми власних значень симетричних матриць.

Вступ. Задачі алгебраїчної проблеми власних значень (АПВЗ) з симетричними матрицями виникають при розв'язуванні багатьох прикладних задач. Наприклад, в задачах на власні коливання конструкцій або систем при використанні методу скінченних елементів виникають АПВЗ (як правило, узагальнені) з симетричними матрицями, які дають наближений розв'язок вихідної задачі. При розв'язуванні методом скінченних елементів початково-крайових задач або задач спектрального аналізу розв'язування узагальненої АПВЗ часто є одним з етапів отримання наближеного розв'язку відповідної дискретної задачі.

В практичних задачах вихідні дані як правило задаються з похибками, що призводить до похибок в даних відповідної АПВЗ, яка є одним з етапів отримання розв'язку вихідної задачі. Розв'язок АПВЗ, як правило, наближений через використання наближених методів розв'язування, а також отримання цього розв'язку на комп'ютері. Тому актуальною є проблема достовірності комп'ютерних розв'язків АПВЗ.

При використанні методу розвинення за формами власних коливань виникає необхідність в розв'язуванні часткової АПВЗ. При цьому до суттєвих похибок може призвести втрата однієї з необхідних форм.

У даній роботі отримано апостеріорні оцінки похибок розв'язків узагальненої алгебраїчної проблеми власних значень з симетричними матрицями, одна з яких додатно визначена. Також розглядається методика апостеріорного комп'ютерного дослідження розв'язків частко-

вої узагальненої АПВЗ з
таками ж матрицями.

1. Постановка задачі. Узагальнена АПВЗ (АПВЗ, алгебраїчна задача на власні значення) полягає у знаходженні таких чисел λ, при яких існують відмінні від нульового розв'язки системи лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$Ax = \lambda Bx, \quad A, B \in M^{n\times n}, \quad x \in C^n, \quad \lambda \in C, \tag{1}$$

де $M^{n\times n}$ – множина квадратних матриць порядку n. Числа λ називають власними значеннями задачі (1), а вектори x – власними векторами цієї задачі.

Може бути поставлено такі задачі на власні значення:

- повна проблема власних значень – знайти всі власні значення та всі власні вектори;
- часткова проблема власних значень – знайти одне або декілька власних значень і відповідних їм векторів або тільки власні значення (всі або декілька).

При розв'язуванні прикладних задач рідко виникають АПВЗ з точними вихідним даними:

$$\overline{A}\overline{x} = \overline{\lambda}\overline{B}\overline{x}\,. \tag{2}$$

Найтиповішою є постановка задачі (1) і завдання відповідних похибок у вихідних даних:

$$\left\|A-\overline{A}\right\| = \left\|\Delta A\right\| \le \varepsilon_A \left\|A\right\|, \qquad \left\|B-\overline{B}\right\| = \left\|\Delta B\right\| \le \varepsilon_B \left\|B\right\|. \tag{3}$$

При цьому припускається, що структура матриць вихідної задачі (2) і збуреної задачі (1), (3) не змінюється, тобто якщо вихідна матриця є симетричною, то і збурена залишається симетричною, якщо вихідна – стрічкова, то і збурена – стрічкова тощо.

Не завжди близькість елементів A і $\overline{A}$, а також B і $\overline{B}$ забезпечує близькість власних значень. Похибка розв'язку внаслідок наближених даних задачі є спадковою похибкою. До повної похибки розв'язку входить також обчислювальна похибка. Ця похибка є як наслідком неточності виконання арифметичних операцій на комп'ютері, так і похибки методу отримання розв'язку. Адже задачі на власні значення є нелінійними задачами та у переважній більшості випадків розв'язуються наближеними (ітераційними) методами.

Крім того внаслідок наближеного методу можлива ситуація, коли не всі необхідні розв'язки задачі буде знайдено. Наприклад, при розв'язуванні часткової АПВЗ методом ітерацій на підпросторі початковий підпростір може виявитися ортогональним до одного з шуканих власних векторів, який разом з відповідним власним значенням у такому разі не буде знайдений. Отже, такі випадки також потребують окремого дослідження.

Таким чином, розв'язування АПВЗ з наближеними даними полягає у дослідженні математичних властивостей задачі, у визначенні одного з допустимих розв'язків цієї задачі, в оцінці спадкової і обчислювальної похибок розв'язку та в дослідженні отриманого розв'язку. Останні дві задачі складають дослідження достовірності розв'язків АПВЗ і розглядаються далі.

2. Оцінки похибок розв'язків узагальненої АПВЗ

Розглядатимемо випадок задачі (1) або (2) з симетричними матрицями A і B. Власні значення АПВЗ симетричних матриць дійсні. Тому вважатимемо, що власні значення впорядковано за зростанням:

$$\lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_n \quad \text{та} \quad \bar{\lambda}_1 \le \bar{\lambda}_2 \le \ldots \le \bar{\lambda}_n. \tag{4}$$

Оцінки похибок розв'язків узагальненої АПВЗ (1) з симетричними матрицями A і B базуються на зведенні узагальненої задачі до стандартної $Cy = \lambda y$ або $Cz = \lambda^{-1}z$ і використанні відповідних оцінок похибок. Найбільш просто можна звести задачу (1) до однієї з цих стандартних задач, поклавши $C = B^{-1}A$ і $y = x$ у випадку існування оберненої матриці B^{-1} або $C = A^{-1}B$ і $z = x$ у випадку існування A^{-1}. Але в такому разі матриця C стандартної АПВЗ в загальному випадку не буде симетричною, а дослідження цього випадку більш складне, ніж випадку симетричної проблеми власних значень. Тому використовуватимемо такі зведення узагальненої АПВЗ до стандартної, щоб матриця C була симетричною.

Оцінки похибок стандартної АПВЗ симетричної матриці дають наступні твердження [1 – 4].

Твердження 1. Нехай $\tilde{\lambda}, \tilde{x}$ – наближена власна пара матриці A. Тоді знайдеться власне значення λ_i матриці A, для якого виконуватиметься нерівність ($r = A\tilde{x} - \tilde{\lambda}\tilde{x}$)

$$\min_j \left|\tilde{\lambda} - \lambda_j\right| = \left|\tilde{\lambda} - \lambda_i\right| \le \|r\| / \|\tilde{x}\|. \tag{5}$$

Якщо власний вектор нормований ($\|\tilde{x}\| = 1$), $\left|\tilde{\lambda} - \lambda_i\right| \le \|r\|$.

Твердження 2. Нехай $\tilde{\lambda}, \tilde{x}$ – наближене власне значення і відповідний нормований власний вектор ($\|\tilde{x}\| = 1$) матриці A. Припустимо, також, що $\tilde{\lambda}$ наближає, в загальному випадку, кратне власне значення λ_i, $i = p, p+1, \ldots, q$ матриці A. Тоді, якщо для $j \ne p, p+1, \ldots, q$, $\left|\tilde{\lambda} - \lambda_j\right| \ge s_i$, то існує вектор $f = \alpha_p x_p + \ldots + \alpha_q x_q$ для якого

$$\|\tilde{x} - f\| \le \|r\| / s_i. \tag{6}$$

Оцінки (5), (6) є оцінками обчислювальної похибки отриманого наближення до власних значень і власних векторів симетричної матриці. Використовуючи ці оцінки можна отримати оцінки спадкової похибки: якщо $\bar{\lambda}, \bar{x}$ власна пара матриці $\bar{A} = A - \Delta A$ ($\|\Delta A\| \le \varepsilon_A \|A\|$), то, враховуючи, що у цьому випадку $r = \Delta A\bar{x}$, маємо

$$\left|\bar{\lambda} - \lambda_i\right| \le \|\Delta A\|, \quad \|\bar{x} - f\| \le \|\Delta A\| / s_i. \tag{7}$$

За умови симетричності обох (A та $\bar{A}$) матриць $\lambda \equiv \lambda_i$.

Повернемося до узагальненої проблеми симетричних матриць. Запропонований вище підхід до отримання оцінок похибок важливий з методологічної точки зору: він однаковий як для отримання спадкової похибки, так і для обчислювальної та повної похибок.

Розглянемо спочатку випадок додатно визначеної матриці B. Тоді існує її LL^T-розвинення і задачу (1) можна звести до стандартної задачі ($B = L_B L_B^T$)

$$Cy = \lambda y \left(C = L_B^{-1} A L_B^{-T},\ \ y = L_B^T x \right) \tag{8}$$

з симетричною матрицею C, власні значення якої збігаються з власними значеннями задачі (1). Використовуючи оцінки (5), (6), легко довести наступне твердження.

Твердження 3. Нехай $\tilde{\lambda}, \tilde{x}$ – наближене власне значення і відповідний власний вектор задачі (1). Припустимо, також, що $\tilde{\lambda}$ наближає, в загальному випадку, кратне власне значення λ_i, $i = p, p{+}1, \ldots, q$ задачі. Тоді знайдеться власне значення λ_i задачі (1), для якого виконуватиметься нерівність

$$\min_j \left|\tilde{\lambda} - \lambda_j\right| = \left|\tilde{\lambda} - \lambda_i\right| \le \left\| L_B^{-1} r \right\| / \left\| \tilde{x} \right\|_B , \tag{9}$$

а якщо для $j \ne p, p{+}1, \ldots, q$, $\left|\tilde{\lambda} - \lambda_j\right| \ge s_i$, то існує вектор $f = \alpha_p x_p + \ldots + \alpha_q x_q$ для якого

$$\left\| \tilde{x} - f \right\| \le \left\| L_B^{-1} r \right\| / \left\| s_i \tilde{x} \right\|_B . \tag{10}$$

Тут x_i – власні вектори задачі (1), $\|v\|_B^2 = v^T B v$, $r = A\tilde{x} - \tilde{\lambda} B \tilde{x}$ – нев’язка задачі (1).

Але в практичних задачах досить часто зустрічаються випадки, коли матриця B є додатно *напіввизначеною*, а матриця A – додатно визначеною. В цих випадках можна отримати оцінки відносні похибки наближених власних значень. Отже, існує розвинення матриці $A = L_A L_A^T$. Тоді узагальнену задачу (1) можна звести до наступної стандартної задачі на власні значення

$$Cy = \mu y \left(C = L_A^{-1} B L_A^{-T},\ \ y = L_A^T x \right) \tag{11}$$

з симетричною матрицею C. Ненульові власні значення задачі (11) $\mu = \lambda^{-1}$ є оберненими до власних значень задачі (1). Кількість цих власних значень дорівнює рангу матриці B. Використовуючи оцінки (5), (6) для наближеної власної пари $\left(\tilde{\mu} = \tilde{\lambda}^{-1}, L_A^T \tilde{x} \right)$ задачі (11), можна довести наступне твердження.

Твердження 4. Нехай $\tilde{\lambda}, \tilde{x}$ – наближене власне значення і відповідний власний вектор задачі (1). Припустимо, також, що $\tilde{\lambda}$ наближає, в загальному випадку, кратне власне значення λ_i, $i = p, p{+}1, \ldots, q$ задачі. Тоді знайдеться власне значення λ_i задачі (1), для якого виконуватиметься нерівність

$$\min_j \left|\frac{\tilde{\lambda}-\lambda_j}{\lambda_j}\right| = \left|\frac{\tilde{\lambda}-\lambda_i}{\lambda_i}\right| \le \left\|L_A^{-1} r\right\| / \left\|\tilde{x}\right\|_A, \tag{12}$$

де $\|v\|_A^2 = v^T A v$, а якщо для $j \ne p, p+1, \ldots, q$, $\left|\left(\tilde{\lambda}-\lambda_j\right)\lambda_j^{-1}\right| \ge \sigma_i$, то існує вектор $f = \alpha_p x_p + \ldots + \alpha_q x_q$ для якого

$$\left\|\tilde{x} - f\right\| \le \left\|L_A^{-1} r\right\| / \left\|\sigma_i \tilde{x}\right\|_A. \tag{13}$$

Оцінки (9), (10) та (12), (13) є оцінками обчислювальної похибки отриманого наближення до власних значень і власних векторів задачі (1). Як і у випадку стандартної проблеми, використовуючи умови (3) та ці оцінки, можна отримати відповідні оцінки спадкової похибки.

Треба зазначити, що в практичних задачах на власні значення матриця B часто є діагональною, але напівозначеною. Тому з метою зменшення кількості арифметичних операцій доцільно замість оцінок (12), (13) отримати оцінки, в яких використовується B-нормування. Справедлива наступна теорема.

Теорема 1. Нехай $\tilde{\lambda}$, $\tilde{x}$ – наближене власне значення і відповідний власний вектор задачі (1). Припустимо, також, що $\tilde{\lambda}$ наближає, в загальному випадку, кратне власне значення λ_i, $i = p, p+1, \ldots, q$ задачі. Тоді знайдеться власне значення λ_i задачі (1), для якого виконуватиметься нерівність

$$\min_j \left|\frac{\tilde{\lambda}-\lambda_j}{\lambda_j}\right| = \left|\frac{\tilde{\lambda}-\lambda_i}{\lambda_i}\right| \le \frac{\left\|A^{-1} r\right\|_B}{\left\|\tilde{x}\right\|_B}, \tag{14}$$

а якщо для $j \ne p, p+1, \ldots, q$, $\left|\left(\tilde{\lambda}-\lambda_j\right)\lambda_j^{-1}\right| \ge \sigma_i$, то існує вектор $f = \alpha_p x_p + \ldots +$ $+\ \alpha_q x_q$ для якого

$$\left\|\tilde{x} - f\right\| \le \frac{\left\|A^{-1} r\right\|_B}{\left\|\sigma_i \tilde{x}\right\|_B}. \tag{15}$$

Доведення. Оцінки (14), (15) можна отримати, використовуючи розвинення вектора $\tilde{x}$ за власними векторами задачі (1):

$$\tilde{x} = \sum_{j=1}^{k} \beta_j x_j, \quad \beta_j = x_j^T B \tilde{x},$$

де k – ранг матриці B. Тоді

$$A^{-1} r = \tilde{\lambda} A^{-1}\left(\tilde{\lambda}^{-1} A\tilde{x} - B\tilde{x}\right) = \tilde{\lambda} A^{-1} \sum_{j=1}^{k} \beta_j \left(\tilde{\lambda}^{-1} A x_j - B x_j\right) = \sum_{j=1}^{k}\left(1-\tilde{\lambda}\lambda_j^{-1}\right)\beta_j x_j,$$

$$\left\|A^{-1} r\right\|_B^2 = \sum_{j=1}^{k}\left(1-\tilde{\lambda}\lambda_j^{-1}\right)\beta_j^2 x_j^T B x_j \ge \left(1-\tilde{\lambda}\lambda_i^{-1}\right)\left\|\tilde{x}\right\|_B^2.$$

Звідси й отримуємо оцінки (14), (15).

Зауваження. Для розв'язування часткової узагальненої АПВЗ (1) часто використовують метод ітерацій на підпросторі [1]. Якщо в оцінках (14), (15) обчислення вектора $A^{-1}r$ виконувати за формулою $A^{-1}r = \tilde{x} - \tilde{\lambda}A^{-1}\left(B\tilde{x}\right)$, кількість арифметичних операцій приблизно дорівнює кількості арифметичних операцій на одній ітерації вищеназваного методу.

Оцінки (9), (10), (12) – (15) апробовано при розв'язуванні задач часткової узагальненої АПВЗ з розрідженими симетричними матрицями. Оцінку (14) реалізовано в інтелектуальному програмному забезпеченні розв'язування задач обчислювальної математики [5].

3. Дослідження отриманого розв'язку часткової АПВЗ

Окремого дослідження вимагають розв'язки часткової АПВЗ. Отримавши розв'язок, необхідно переконатися, що знайдено всі необхідні власні значення (і відповідні власні вектори). Наприклад, при обчисленні m мінімальних власних значень може виникнути ситуація, коли замість одного з них обчислено $(m+1)$-е власне значення. Зокрема, подібні ситуації можуть виникати при розв'язуванні часткової АПВЗ методом ітерацій на підпросторі, якщо початковий підпростір E_0 виявиться B-ортогональним до одного з шуканих власних векторів. До того ж більш складно забезпечити апріорну B-ортогональність початкового підпростору до всіх шуканих векторів при розв'язуванні задачі на MIMD-комп'ютері, використовуючи паралельний алгоритм методу ітерацій на підпросторі [6], через те, що матриця векторів, на які натягнуто початковий підпростір, формуються розподіленою між паралельними процесами.

Виявити ситуацію, коли через ортогональність до початкового підпростору не знайдено одну (або більше) з шуканих власних пар, можна, використовуючи властивість послідовності Штурма [1] для задачі (1). Ця властивість базується на тому факті [6], що за умови додатної визначеності матриці B задачі (1) збігаються кількості від'ємних, нульових і додатних власних значень задачі (1) і матриці A цієї задачі. А кількості від'ємних і додатних власних значень невиродженої симетричної матриці дорівнюють відповідно кількостям від'ємних і додатних елементів діагональної матриці D з LDL^{T}-розвинення цієї матриці. Якщо матриця B задачі (1) додатно напіввизначена, а матриця A додатно визначена, то те ж саме справедливо щодо першої матриці задачі

$$Bx = \mu Ax. \tag{17}$$

Зауважимо, що власні значення задачі (17) та задачі (1) зв’язано співвідношенням $\lambda_i\mu_i = 1$ за умов $\lambda_i \neq 0$, $\mu_i \neq 0$.

Розглянемо задачу $(A - \sigma B)x = \nu Bx$, якщо B додатно визначена матриця, або задачу $(A - \sigma B)x = \nu Ax$, якщо A додатно визначена матриця. Легко переконатися, що від’ємні власні значення цих задач відповідають власним значенням задачі (1), які менші за σ. Дійсно, у першому випадку $\nu_i = \lambda_i - \sigma$, в другому – $\nu_i = 1 - \sigma\mu_i$, отже, $\sigma > \mu_i^{-1} = \lambda_i$.

Таким чином, виконавши LDL^{T}-розвинення матриці $A - \sigma B$ і підрахувавши число від’ємних елементів діагональної матриці D, можна визначити кількість власних значень задачі (1) менших за σ. Через те, що матриця $A - \sigma B$ є знаконевизначеною, для забезпечення стійкості при LDL^{T}-розвиненні зсув σ необхідно вибирати більшим за максимальне з власних значень, які випробовуються, враховуючи кратність або патологічну близькість у межах точності обчислень, наприклад $\sigma = 1{,}001\lambda_r$.

Цим же способом також можна визначити кількість власних значень в інтервалі $[\sigma_1, \sigma_2]$.

Запропонована методика апостеріорного комп’ютерного дослідження розв’язків часткової узагальненої АПВЗ реалізовано в інтелектуальному програмному забезпеченні розв’язування задач обчислювальної математики [5].

А.В. Попов

КОМПЬЮТЕРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДОСТОВЕРНОСТИ РЕШЕНИЙ
ОБОБЩЕННОЙ АЛГЕБРАИЧЕСКОЙ ПРОБЛЕМЫ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Рассматривается обобщенная алгебраическая проблема собственных значений с симметричными матрицами. Получены оценки погрешностей собственных значений и собственных векторов обобщенной проблемы с симметричными матрицами, одна из которых положительно определена. Исследована достоверность решений частичной обобщенной проблемы собственных значений симметричных матриц.

A.V. Popov

COMPUTER INVESTIGATION OF RELIABILITY OF SOLUTIONS
TO THE GENERALIZED ALGEBRAIC EIGENVALUE PROBLEM

Generalized eigenvalue problem with symmetric matrices is dealt with. Error estimates are obtained for eigenvalues and eigenvectors of the generalized eigenvalue problem with symmetric matrices, one of which being positive-definite. Reliability of solutions to partial eigenvalue problem with symmetric matrices is investigated.

1. *Бате К., Вильсон Е.* Численные методы анализа и метод конечных элементов. – М.: Стройиздат, 1982. – 447 с.
2. *Парлетт Б.* Симметричная проблема собственных значений. – М.: Мир, 1983. – 318 с.
3. *Икрамов Х.Д.* Несимметричная проблема собственных значений. – М.: Наука, 1991. – 239 с.
4. *Химич А.Н.* Оценки полной погрешности в симметричной проблеме собственных значений // Технология и методы решения задач прикладной математики. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова АН УССР, 1991. – С. 85–88.
5. *Химич А.Н., Молчанов И.Н., Мова В.И.* и др. Численное программное обеспечение интеллектуального MIMD-компьютера Инпарком. – К.: Наук. думка, 2007. – 216 с.
6. *Стренг Г.* Линейная алгебра и ее применения. – М.: Мир, 1980. – 426 с.

Отримано 15.12.2011

Про автора:

Попов Олександр Володимирович,
кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України.