

УДК 519.614

Быстродействующие алгоритмы диагонализации трехдиагональных симметричных матриц на основе элементарных плоских вращений

В.И. Иордан

Алтайский государственный университет (Барнаул, Россия)

High-Performance Algorithms for Tridiagonal Symmetric Matrices Diagonalization Based on Elementary Planar Rotations

V.I. Jordan

Altai State University (Barnaul, Russia)

Рассматриваются два алгоритма диагонализации действительных трехдиагональных симметричных матриц, сохраняющие инвариантной (неизменной) трехдиагональную форму и обеспечивающие высокое быстродействие, сравнимое с наиболее быстродействующими алгоритмами QR-метода и аналогичными методами. Предлагаемые алгоритмы диагонализации матриц используют элементарные плоские вращения, которые по сравнению с преобразованиями отражений обладают абсолютной устойчивостью вычислений по Уилкинсону. Приведено доказательство абсолютно устойчивой сходимости предлагаемых алгоритмов, определяющейся по своей сути «интегральными» свойствами в отличие от «дифференциальных» свойств окрестности сходимости в QR-методе, для которого на практике все-таки встречаются случаи неустойчивости и потери точности вычисления собственных чисел. Рассмотрены априорные оценки максимальных погрешностей диагонализации для каждого предлагаемого алгоритма и зависимости временных затрат на диагонализацию матриц алгоритмами автора и QR-методом, полученных на основе вычислительных экспериментов для широкого класса трехдиагональных симметричных матриц.

Ключевые слова: трехдиагональная симметричная матрица, плоские вращения, быстродействие, алгоритмы диагонализации матриц.

DOI 10.14258/izvasu(2017)1-15

Введение. Как известно [1], наиболее эффективные методы Гивенса и Хаусхолдера приводят квадратную симметрическую матрицу размерности n к трехдиагональной симметричной форме за конечное число шагов (объем вычислений пропорционален n^3). Алгоритмы диагонализации, использующие ортогональные преоб-

This paper discusses two algorithms for diagonalization of real symmetric tridiagonal matrices. The proposed algorithms preserve the invariant (unchanged) tridiagonal form and provide high performance comparable with the most high-performance QR-algorithms and similar techniques. Contrary to the transformations of reflections, the presented algorithms of matrices diagonalization using elementary planar rotations have absolute stability of calculations (Wilkinson stability). In this paper, the absolutely stable convergence of the proposed algorithms is proved. Convergence criteria are defined inherently by “integral” properties in contrast with “differential” properties of neighborhood convergence of QR-algorithms (in practice, QR-algorithms are prone to instability and loss of accuracy for eigenvalues computation under certain conditions). A priori estimates of maximum values of diagonalization error for proposed algorithms are provided. Also, the paper discusses the results of numerical experiments for a wide class of symmetric matrices conducted to elaborate matrices diagonalization time dependencies for QR-techniques and proposed algorithms.

Key words: tridiagonal symmetric matrix, planar rotations, high-performance, algorithms for matrices diagonalization.

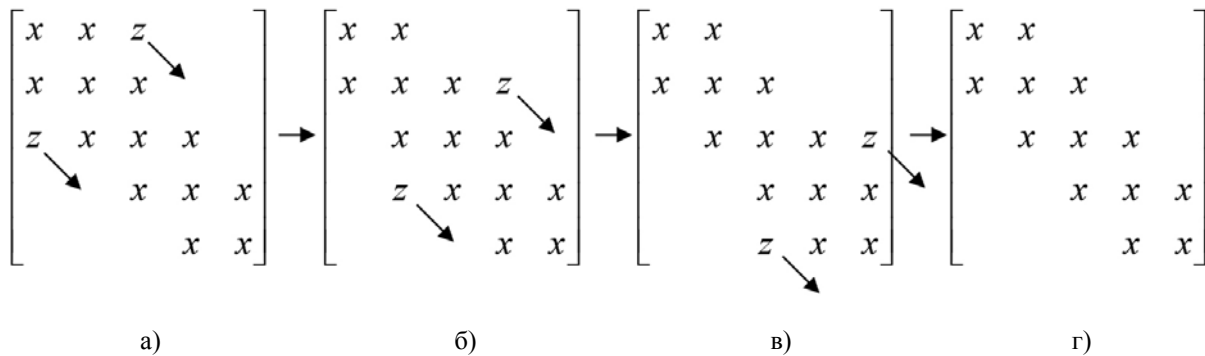
разования и сохраняющие инвариантной (неизменной) трехдиагональную форму, характеризуются меньшим объемом порядка n^2 . К таким эффективным алгоритмам относятся алгоритмы QR-метода, различающиеся стратегией выбора так называемого «сдвига» (сдвиги Релея, Уилкинсона и др. [1-7]). Несмотря на очень высокое

быстродействие и теоретически обоснованную устойчивость вычислений в QR-методе, при использовании «отражений» на практике, хотя и редко, но все-таки происходят случаи потери точности или неустойчивости вычислений [1, 8]. В случае патологически близких собственных чисел матрицы значения «сдвигов» могут приближаться то к одному, то к другому собственному числу матрицы (возможна неустойчивость сходимости [8]). То есть в QR-методе сходимость определяется близостью значения сдвига к собственному числу (малой окрестностью), иначе говоря, сходимость зависит от дифференциальных свойств плотности распределения спектра собственных чисел матрицы.

В данной работе рассматриваются два алгоритма диагонализации трехдиагональных симметричных матриц на основе плоских вращений (обозначение первого – MS3DTG90, второго – MS3DTGJac), сохраняю-

щие инвариантной трехдиагональную симметричную форму и обеспечивающие абсолютную сходимость и устойчивость, а также высокое быстродействие, сравнимое с быстродействием алгоритмов QR-метода.

1. Математическое обоснование алгоритмов MS3DTG90 и MS3DTGJac. В предлагаемых алгоритмах производится последовательность так называемых «больших» итераций (БИ), состоящих из $(n-1)$ элементарных плоских вращений в плоскостях с центрами $(i, i+1)$, где $i = 1, 2, \dots, (n-1)$. На $(k+1)$ -ой «большой итерации (БИ)», где $k = 0, 1, 2, \dots$, в результате 1-го вращения в плоскости $(1, 2)$, осуществляемого двусторонним матричным преобразованием с помощью матрицы $U_1^{(k+1)}$, нулевые значения элементов $a_{13}^{(k)}$ и $a_{31}^{(k)}$ матрицы $A^{(k)}$ пересчитываются в ненулевые элементы («выступы» z на рисунке а, элементы 3 диагонали матрицы 5-го порядка обозначены символом x).



Структурное отображение преобразований матрицы $A^{(k)}$ на $(k+1)$ -ой БИ

На фрагментах рисунка показаны результаты последующих вращений Гивенса в плоскостях с центрами $(i, i+1)$, где $i = 2, 3, 4$. В результате двустороннего преобразования вращениями Гивенса [1] в конце $(k+1)$ -ой БИ выступы z «сгоняются» за пределы матрицы и восстанавливается трехдиагональный вид:

$$A^{(k+1)} = T_{k+1}^t \cdot A^{(k)} \cdot T_{k+1}, \quad (1)$$

где T_{k+1} — матрица ортогонального преобразования (T_{k+1}^t — транспонированная матрица) определяется факторизацией матриц элементарных вращений $U_i^{(k+1)}$:

$$T_{k+1} = U_1^{(k+1)} \cdot U_2^{(k+1)} \dots U_{n-1}^{(k+1)}. \quad (2)$$

В матрице $U_i^{(k+1)}$ отличны от нуля только лишь элементы [1, с. 127]: а) в позициях (i, i) и $(i+1, i+1)$ определено значение $c_i^{(k+1)}$ — косинуса угла вращения; б) оставшиеся диагональные элементы равны 1; в) в позициях $(i, i+1)$ и $(i+1, i)$ определены, соответственно, значения синуса $s_i^{(k+1)}$ и $(-s_i^{(k+1)})$. Определенное число БИ производит в верхней части матрицы отделение двух собственных чисел для алгоритма MS3DTG90, а для алгоритма MS3DTGJac —

трех собственных чисел (происходит «исчерпывание матрицы сверху» [1, 8]). То есть в верхней части матрицы «удлинняется» диагональная структура собственных чисел, а в нижней части сокращается трехдиагональная структура (рис., г). В конце всех этапов исчерпывания матрица имеет диагональный вид.

На каждой $(k+1)$ -ой БИ для первого алгоритма MS3DTG90 начальное вращение в плоскости $(1, 2)$ осуществляется на ± 90 градусов [8]

$$c_1^{(k+1)} = 0, \quad s_1^{(k+1)} = \pm 1, \quad (3)$$

Во втором алгоритме MS3DTGJac начальным является вращение Якоби [8], т.е. тангенс двойного угла начального вращения определяется выражением

$$tg(2 \cdot \varphi_1^{(k+1)}) = 2 \cdot b_1^{(k)} / (a_1^{(k)} - a_2^{(k)}), \quad (4)$$

где через $b_i^{(k)}$ обозначены элементы двух симметрично совпадающих кодиагоналей матрицы $A^{(k)}$, а через $a_i^{(k)}$ — элементы диагонали матрицы $A^{(k)}$. Значение угла вращения в плоскости $(1, 2)$ согласно (4) необходимо выбирать наименьшим по модулю. Отметим, что вращение (4) обнуляет элемент $b_1^{(k)}$,

и поэтому следующее вращение Гивенса для «сгона выступа вниз» (рис., а) по своей алгоритмической сути совпадает с начальным вращением алгоритма MS3DTG90, так как $c_2^{(k+1)} = 0$ и $s_2^{(k+1)} = \text{sign}(s_1^{(k+1)})$, т.е. $|s_2^{(k+1)}| = 1$. Последующие вращения для алгоритма MS3DTGJас в плоскостях $(i, i+1)$, где $i = 3, 4, \dots, n-1$, структурно и по алгоритмической сути совпа-

дают с последовательностью вращений алгоритма MS3DTG90 с той лишь разницей, что эти вращения в алгоритме MS3DTGJас совершаются, начиная с плоскости $(2, 3)$. Ниже для этих алгоритмов приведены общие выражения (согласно рис.) для вращений в плоскостях $(i, i+1)$, где $i = 2, 3, \dots, n-1$:

$$\begin{cases} b_{i-1}^{(k+1)} = [(\tilde{b}_{i-1}^{(k+1)})^2 + (b_i^{(k)} \cdot s_{i-1}^{(k+1)})^2]^{1/2}, & i = 2, 3, \dots, n-1; \\ c_i^{(k+1)} = \tilde{b}_{i-1}^{(k+1)} / b_{i-1}^{(k+1)}, & s_i^{(k+1)} = (b_i^{(k)} \cdot s_{i-1}^{(k+1)}) / b_{i-1}^{(k+1)}, & i = 2, 3, \dots, n-1; \\ a_i^{(k+1)} = \tilde{a}_i^{(k+1)} \cdot (c_i^{(k+1)})^2 + a_{i+1}^{(k)} \cdot (s_i^{(k+1)})^2 + 2 \cdot b_i^{(k)} \cdot c_{i-1}^{(k+1)} \cdot c_i^{(k+1)} \cdot s_i^{(k+1)}, \\ \tilde{a}_{i+1}^{(k+1)} = a_{i+1}^{(k)} \cdot (c_i^{(k+1)})^2 + \tilde{a}_i^{(k+1)} \cdot (s_i^{(k+1)})^2 - 2 \cdot b_i^{(k)} \cdot c_{i-1}^{(k+1)} \cdot c_i^{(k+1)} \cdot s_i^{(k+1)}, \\ \tilde{b}_i^{(k+1)} = (a_{i+1}^{(k)} - \tilde{a}_i^{(k+1)}) \cdot c_i^{(k+1)} \cdot s_i^{(k+1)} + b_i^{(k)} \cdot c_{i-1}^{(k+1)} \cdot [(c_i^{(k+1)})^2 - (s_i^{(k+1)})^2]; \\ b_{n-1}^{(k+1)} = \tilde{b}_{n-1}^{(k+1)}; & a_n^{(k+1)} = \tilde{a}_n^{(k+1)}; & i = 1, 2, \dots, n-1. \end{cases}$$

С целью уменьшения числа мультипликативных операций (умножений, делений) запишем алгоритм в более рациональной форме [8]:

$$\begin{cases} x = b_i^{(k)} \cdot c_{i-1}^{(k+1)}, & y_1 = b_i^{(k)} \cdot s_{i-1}^{(k+1)}, & b_{i-1}^{(k+1)} = [(\tilde{b}_{i-1}^{(k+1)})^2 + y_1^2]^{1/2}, \\ c_i^{(k+1)} = \tilde{b}_{i-1}^{(k+1)} / b_{i-1}^{(k+1)}, & s_i^{(k+1)} = y_1 / b_{i-1}^{(k+1)}, & i = 2, 3, \dots, n-1; \\ y_2 = (a_{i+1}^{(k)} - \tilde{a}_i^{(k+1)}) \cdot s_i^{(k+1)} + x \cdot (c_i^{(k+1)} + c_i^{(k+1)}), \\ \tilde{b}_i^{(k+1)} = y_2 \cdot c_i^{(k+1)} - x, & b_{n-1}^{(k+1)} = \tilde{b}_{n-1}^{(k+1)}, & y_3 = y_2 \cdot s_i^{(k+1)}, \\ a_i^{(k+1)} = \tilde{a}_i^{(k+1)} + y_3, & \tilde{a}_{i+1}^{(k+1)} = a_{i+1}^{(k)} - y_3, & a_n^{(k+1)} = \tilde{a}_n^{(k+1)}; & i = 1, 2, \dots, n-1. \end{cases} \quad (5)$$

В $(k+1)$ -ой БИ диагональные элементы $a_i^{(k)}$, кроме первого и последнего, пересчитываются два раза вращениями в плоскостях $(i-1, i)$ и $(i, i+1)$, а симметричные элементы $b_i^{(k)}$ двух кодиагоналей, кроме первого и последнего, пересчитываются три раза вращениями в плоскостях $(i-1, i)$, $(i, i+1)$ и $(i+1, i+2)$. Элемент $a_i^{(k)}$ после вращения в плоскости $(i, i-1)$ обозначен как $\tilde{a}_i^{(k+1)}$, а его результирующее значение $a_i^{(k+1)}$ в $(k+1)$ -ой БИ определяется вращением в плоскости $(i, i+1)$. Элемент $b_i^{(k)}$ вращением в плоскости $(i-1, i)$ пересчитывается как $b_i^{(k)} \cdot c_{i-1}^{(k+1)}$, после вращения в пло-

скости $(i, i+1)$ он обозначен как $\tilde{b}_i^{(k+1)}$, а после вращения в плоскости $(i+1, i+2)$ определяется его результирующее значение $b_i^{(k+1)}$ в $(k+1)$ -ой БИ. Значения $c_1^{(k+1)}$ и $s_1^{(k+1)}$ в алгоритмах MS3DTG90 и MS3DTGJас определяются, соответственно, формулами (3) и (4); остальные же вращения – группой формул (5).

1.1. Сходимость алгоритма MS3DTG90. В каждой $(k+1)$ -ой БИ вращение в плоскости $(1, 2)$ определяет: $c_1^{(k+1)} = 0$, $s_1^{(k+1)} = \pm 1$. Смена знака $s_1^{(k+1)}$ результат $(k+1)$ -ой БИ не изменяет (положим $s_1^{(k+1)} = 1$). Вращения в плоскостях $(1, 2)$ и $(2, 3)$ дают результаты [8]

$$\begin{aligned} a_1^{(k+1)} &= a_2^{(k)}, & \tilde{a}_2^{(k+1)} &= a_1^{(k)}, & \tilde{b}_1^{(k+1)} &= -b_1^{(k)}, & a_2^{(k+1)} &= a_1^{(k)} + x, & \tilde{a}_3^{(k+1)} &= a_3^{(k)} - x, \\ x &= (a_3^{(k)} - a_1^{(k)}) \cdot (s_2^{(k+1)})^2, & B_{k+1} &= [(a_3^{(k)} - a_1^{(k)})^2 \cdot (c_2^{(k+1)})^2 + (b_3^{(k)})^2]^{1/2}. \end{aligned}$$

$$b_1^{(k+1)} = [(b_1^{(k)})^2 + (b_2^{(k)})^2]^{1/2}, \quad (6)$$

$$s_2^{(k+1)} = b_2^{(k)} / b_1^{(k+1)}, \quad c_2^{(k+1)} = -b_1^{(k)} / b_1^{(k+1)}, \quad (7)$$

$$b_2^{(k+1)} = |s_2^{(k+1)}| \cdot [(a_3^{(k)} - a_1^{(k)})^2 \cdot (c_2^{(k+1)})^2 + (b_3^{(k)})^2]^{1/2} = B_{k+1} \cdot |s_2^{(k+1)}|, \quad (8)$$

Теорема 1. Алгоритм MS3DTG90, определяемый начальным вращением (3) и соотношениями (5), абсолютно сходится.

Доказательство. При $k \rightarrow \infty$ из (6) следует $b_1^{(\infty)} = [(b_1^{(0)})^2 + \sum_{k=0}^{\infty} (b_2^{(k)})^2]^{1/2}$.

Как известно [1, 8], евклидова норма матрицы и ее квадрат (сумма квадратов элементов матрицы) являются инвариантами матрицы (сохраняются в процессе унитарных преобразований). Следовательно, элемент $b_1^{(\infty)}$ ограничен некоторой положительной

константой B , то есть $b_1^{(\infty)} < B$. Поэтому знакочередовательный ряд $\sum_{k=0}^{\infty} (b_2^{(k)})^2$ является абсолютно сходящимся, а по необходимому условию сходимости ряда следует условие $b_2^{(k)} \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$. Отсюда с учетом (6), (7), (8) следует, что $s_2^{(k)} \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$. Начиная с некоторых k , значением $b_2^{(k)}$ можно пренебречь, поэтому в верхней части матрицы отделяется блок 2-го порядка. Вращение Якоби в этом блоке определяет два собственных числа (исчерпывание матрицы сверху). Таким образом, для алгоритма MS3DTG90 выше приведено доказательство абсолютной сходимости, гарантированной независимо от свойств «обусловленности» матрицы.

$$a_1^{(k+1)} = a_1^{(k)} \cdot (c_1^{(k+1)})^2 + a_2^{(k)} \cdot (s_1^{(k+1)})^2 + 2 \cdot b_1^{(k)} \cdot c_1^{(k+1)} \cdot s_1^{(k+1)} = (a_1^{(k)} + a_2^{(k)})/2 + [(a_1^{(k)} - a_2^{(k)})/2] \cdot \cos(2\varphi_1^{(k+1)}) + b_1^{(k)} \cdot \sin(2\varphi_1^{(k+1)})$$

в силу тригонометрических тождеств $(c_1^{(k+1)})^2 = [1 + \cos(2\varphi_1^{(k+1)})]/2$ и $(s_1^{(k+1)})^2 = [1 - \cos(2\varphi_1^{(k+1)})]/2$. Обозначим через $sign1 = sign(a_1^{(k)} + a_2^{(k)})$,

$$sign2 = sign(b_1^{(k)}) \text{ и } SQ = \sqrt{(b_1^{(k)})^2 + [(a_1^{(k)} - a_2^{(k)})/2]^2}.$$

$$\begin{cases} a_1^{(k+1)} = (a_1^{(k)} + a_2^{(k)})/2 + sign1 \cdot SQ, & \tilde{a}_2^{(k+1)} = (a_1^{(k)} + a_2^{(k)})/2 - sign1 \cdot SQ, \\ \tilde{b}_1^{(k+1)} = 0, \end{cases} \quad (10)$$

$$c_1^{(k+1)} = \sqrt{[1 + \cos(2\varphi_1^{(k+1)})]/2}, \quad s_1^{(k+1)} = sign1 \cdot sign2 \cdot \sqrt{[1 - \cos(2\varphi_1^{(k+1)})]/2}.$$

Используя формулы (5), имеем результаты вращений в плоскостях (2,3), (3,4):

$$b_1^{(k+1)} = |b_2^{(k)} \cdot s_1^{(k+1)}|, \quad (11)$$

$$b_2^{(k+1)} = \sqrt{x_{k+1}^2 + (b_3^{(k)})^2}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= b_2^{(k)} \cdot c_1^{(k+1)}, \quad c_2^{(k+1)} = 0, \quad s_2^{(k+1)} = sign(s_1^{(k+1)}), \quad a_2^{(k+1)} = a_3^{(k)}, \quad \tilde{a}_3^{(k+1)} = \tilde{a}_2^{(k+1)}, \\ c_3^{(k+1)} &= -x_{k+1}/b_2^{(k+1)}, \quad s_3^{(k+1)} = b_3^{(k)} \cdot s_2^{(k+1)}/b_2^{(k+1)}, \quad \tilde{b}_3^{(k+1)} = (a_4^{(k)} - \tilde{a}_3^{(k+1)}) \cdot c_3^{(k+1)} \cdot s_3^{(k+1)}, \\ b_3^{(k+1)} &= \sqrt{(\tilde{b}_3^{(k+1)})^2 + (b_4^{(k)} \cdot s_3^{(k+1)})^2} = B_{k+1} \cdot |s_3^{(k+1)}|, \quad B_{k+1} = \sqrt{(a_4^{(k)} - \tilde{a}_3^{(k+1)})^2 \cdot (c_3^{(k+1)})^2 + (b_4^{(k)})^2}, \\ a_3^{(k+1)} &= \tilde{a}_3^{(k+1)} + y_{k+1} = \tilde{a}_2^{(k+1)} + y_{k+1}, \quad y_{k+1} = (a_4^{(k)} - \tilde{a}_3^{(k+1)}) \cdot (s_3^{(k+1)})^2. \end{aligned}$$

Теорема 2. Алгоритм MS3DTGJас, определяемый начальным вращением (9), соотношениями (5) и условиями $sign1 = sign(a_1^{(k)} + a_2^{(k)})$,

1.2. Сходимость алгоритма MS3DTGJас. В каждой $(k+1)$ -ой БИ в плоскости (1,2) производится вращение Якоби [8]:

$$tg(2\varphi_1^{(k+1)}) = 2 \cdot b_1^{(k)} / (a_1^{(k)} - a_2^{(k)}), \quad (9)$$

в результате чего элемент $\tilde{b}_1^{(k+1)} = 0$. Следовательно, вращение в плоскости (2,3) аналогично начальному вращению алгоритма MS3DTG90, так как $c_2^{(k+1)} = 0$ и $s_2^{(k+1)} = sign(s_1^{(k+1)})$. Выбор определенного значения угла $\varphi_1^{(k+1)}$ из возможных связан с обеспечением сходимости алгоритма MS3DTGJас. В $(k+1)$ -ой БИ начальное вращение в плоскости (1,2) определяет элемент $a_1^{(k+1)}$ как

Определив $\cos(2\varphi_1^{(k+1)}) = sign1 \cdot (a_1^{(k)} - a_2^{(k)}) / (2 \cdot SQ)$, $\sin(2\varphi_1^{(k+1)}) = sign1 \cdot b_1^{(k)} / SQ$, которые, очевидным образом, удовлетворяют (9), можно записать

$sign2 = sign(b_1^{(k)})$, абсолютно сходится. Доказательство. С учетом (10) получаем неравенство

$$\begin{aligned} (a_1^{(k+1)})^2 &= (a_1^{(k)} + a_2^{(k)})^2 / 4 + sign1 \cdot (a_1^{(k)} + a_2^{(k)}) \cdot SQ + (SQ)^2 = \\ &= [(a_1^{(k)})^2 + (a_2^{(k)})^2] / 2 + (b_1^{(k)})^2 + sign1 \cdot (a_1^{(k)} + a_2^{(k)}) \cdot SQ \geq \\ &\geq [(a_1^{(k)})^2 + (a_2^{(k)})^2] / 2 + |(a_1^{(k)})^2 - (a_2^{(k)})^2| / 2 + (b_1^{(k)})^2, \end{aligned}$$

анализируя которое, можно записать $(a_1^{(k+1)})^2 \geq (a_1^{(k)})^2 + (b_1^{(k)})^2$, если $|a_1^{(k)}| \geq |a_2^{(k)}|$; либо $(a_1^{(k+1)})^2 \geq (a_2^{(k)})^2 + (b_1^{(k)})^2$, если $|a_2^{(k)}| \geq |a_1^{(k)}|$.

То есть в любом случае $(a_1^{(k+1)})^2 \geq (a_1^{(k)})^2 + (b_1^{(k)})^2$ и, устремив $k \rightarrow \infty$, получим

$$(a_1^{(\infty)})^2 \geq (a_1^{(0)})^2 + \sum_{k=0}^{\infty} (b_1^{(k)})^2. \quad (13)$$

Величина $(a_1^{(\infty)})^2$ ограничена некоторой константой B , так как евклидова норма матрицы сохраняется в унитарных преобразованиях. Следовательно, знакоположительный ряд $\sum_{k=0}^{\infty} (b_1^{(k)})^2$ абсолютно сходится. По необходимому условию сходимости ряда $b_1^{(k)} \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$. Начиная с некоторых k , значением $b_1^{(k)}$ можно пренебречь, и в верхней части матрицы отделяется собственное число, равное значению элемента $a_1^{(k)}$. Однако одновременно с условием $b_1^{(k)} \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$ в соответствии с (11) и (12) и величина $s_1^{(k)} \rightarrow 0$. Следовательно, $c_1^{(k)} \rightarrow 1$ и начиная с некоторого $k = p$, в «асимптотике» (12) можно вы-

разить в виде $b_2^{(k+1)} \cong \sqrt{(b_2^{(k)})^2 + (b_3^{(k)})^2}$, которое в силу свойства рекуррентности позволяет записать выражение $(b_2^{(\infty)})^2 = (b_2^{(p)})^2 + \sum_{k=p}^{\infty} (b_3^{(k)})^2$.

В силу сохранения евклидовой нормы матрицы в унитарных преобразованиях знакоположительный ряд $\sum_{k=p}^{\infty} (b_3^{(k)})^2$ абсолютно сходится. По необходимо-

му условию сходимости ряда $b_3^{(k)} \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$. Начиная с некоторых k значением $b_3^{(k)}$ можно пренебречь, и тем самым отделяется блок 2-го порядка с центрами в плоскости (2,3), вращение Якоби в которой определяет два собственных числа. В итоге производится исчерпывание матрицы сверху в количестве трех собственных чисел. Таким образом, для алгоритма MS3DTGJас гарантируется абсолютная сходимость независимо от свойств «обусловленности» матрицы.

2. Оценки погрешностей и результаты численных экспериментов. Скорость сходимости алгоритмов (процесс исчерпывания) зависит от спектральных свойств исходной матрицы. Для алгоритма MS3DTG90 с учетом формул (6)-(8) можно записать

$$s_2^{(k+1)} = b_2^{(k)} / b_1^{(k+1)} = (B_k / b_1^{(k+1)}) \cdot |s_2^{(k)}| = G_{k+1} \cdot |s_2^{(k)}|, \quad \text{где}$$

$G_{k+1} = B_k / b_1^{(k+1)}$. Так как $b_1^{(k+1)}$ растет, а $s_2^{(k)}$ и $b_2^{(k)}$ стремятся к нулю при $k \rightarrow \infty$, тогда, начиная с некоторых k , величина G_{k+1} становится «сжимающим оператором» ($G_{k+1} < 1$). Чем меньше k , начиная с которого $G_{k+1} < 1$, и чем G_k ближе к нулю, тем быстрее происходит отделение клетки второго порядка сверху, а значит и быстрее происходит полная диагонализация матрицы.

Для алгоритма MS3DTGJас с учетом (11) выражение (9) можно переписать в виде

$$tg(2\varphi_1^{(k+1)}) = G_{k+1} \cdot |s_1^{(k)}|, \quad \text{где } G_{k+1} = 2 \cdot |b_2^{(k-1)}| / (a_1^{(k)} - a_2^{(k)}).$$

Если на первых итерациях разность $|a_1^{(k)} - a_2^{(k)}|$ близка

к нулю, тогда из (9) следует $|\varphi_1^{(k+1)}| \cong \pi/4$ и $|s_1^{(k+1)}| \cong \sqrt{2}/2$,

а из (10) следует $|a_1^{(k+1)} - \tilde{a}_2^{(k+1)}| = 2 \cdot SQ = 2b_1^{(k)}$.

В выражении (13) показано монотонное возрастание $a_1^{(k)}$ при $k \rightarrow \infty$. Следовательно, при $k \rightarrow \infty$

для величины $|G_{k+2}| = 2 \cdot |b_2^{(k)}| / |a_1^{(k+1)} - a_2^{(k+1)}|$ в асимптотическом режиме сходимости будет выполняться условие $|G_{k+1}| \leq 1$, а в соответствии с «замечательными пределами», а также с вышеполученным

выражением $tg(2 \cdot \varphi_1^{(k+1)}) = G_{k+1} \cdot |s_1^{(k)}|$, можно записать:

$$|s_1^{(k+1)}| \cong |G_{k+1} \cdot s_1^{(k)}| / 2 \quad \text{или} \quad |s_1^{(k+1)}| \leq |s_1^{(k)}| / 2.$$

Из последнего неравенства следует, что не более 24 итераций требуется для достижения «одинарной» относительной точности порядка 10^{-7} (при этом отделяется три собственных числа). То есть не более восьми итераций достаточно на отделение одного собственного числа, что подтверждается численными экспериментами [8]. Анализ вычислительных погрешностей алгоритмов MS3DTG90 и MS3DTGJас довольно громоздкий. В [8] подробно изложен вывод априорных оценок погрешностей для этих алгоритмов, имеющих вид:

а) для алгоритма MS3DTG90:

$$\|(\Lambda_A)_M - \Lambda_A\| \leq 67 \cdot k \cdot n^{3/2} \cdot \varepsilon_1 \cdot \|A\|, \quad (14)$$

б) для алгоритма MS3DTGJас:

$$\|(\Lambda_A)_M - \Lambda_A\| \leq 45 \cdot k \cdot n^{3/2} \cdot \varepsilon_1 \cdot \|A\|, \quad (15)$$

где $k \leq 25$; $\varepsilon_1 \cong 0,6 \cdot 10^{-7}$ — в режиме одинарной точности, либо $\varepsilon_1 \cong 0,22 \cdot 10^{-15}$ — в режиме двойной точности вычислений; Λ_A и $(\Lambda_A)_M$ — диагональные матрицы, соответственно, точных и вычисленных алгоритмами собственных чисел трехдиагональных симметрических матриц. Оценки (14) и (15) показывают максимально возможные значения погрешностей при определении собственных чисел матриц, соответственно, алгоритмами MS3DTG90 и MS3DTGJас.

Вычислительные эксперименты для широкого класса трехдиагональных симметричных матриц показали следующие зависимости временных затрат [8]:

а) для QR-алгоритмов: $t = \alpha_\varepsilon \cdot n^2$; б) для алгоритма MS3DTG90: $t = \beta_\varepsilon \cdot n^{1,4}$; в) для алгоритма MS3DTGJас: $t = 0,8 \cdot \beta_\varepsilon \cdot n^{1,4}$. Параметр β_ε оказался на два порядка больше параметра α_ε , но для алгоритмов MS3DTG90 и MS3DTGJас в асимптотике роста n (например, уже при $n \geq 50$) становится «регулярным» исчерпывание матрицы снизу [8], что и объясняет понижение пока-

зателя степени до 1,4. Поэтому выравнивание затрат на диагонализацию матриц алгоритмами MS3DTG90, MS3DTGJac и QR–методом происходит при $n > 700$.

Заключение. В задачах диагонализации трехдиагональных симметричных матриц могут быть использованы алгоритмы MS3DTG90 MS3DTGJac, со-

храняющие инвариантной трехдиагональную форму и обеспечивающие абсолютную сходимость и устойчивость вычислений, а также высокое быстродействие, сравнимое с быстродействием QR-метода при $n \geq 700$.

Библиографический список

1. Уилкинсон Дж.Х., Райнш К. Справочник алгоритмов на языке Алгол. Линейная алгебра. — М., 1976.
2. Парлетт Б. Симметрическая проблема собственных значений. Численные методы / пер. с англ. Х.Д. Икрамова и Ю.А. Кузнецова. — М., 1983.
3. Watkins D.S. The Matrix Eigenvalue Problem: GR and Krylov Methods // D.S. Watkins. — SIAM. — 2007.
4. Prodi G. Eigenvalues of non-linear problems // G. Prodi (ed.). — Berlin Heidelberg, 2010.
5. Новиков М.А. Одновременная диагонализация трех вещественных симметричных матриц // Известия ВУЗов. Математика. — 2014. — № 12.
6. Кочура А.Е., Подколызина Л.В., Ивакин Я.А., Нидзиев И.И. Сингулярные матричные пучки в обобщенной симметричной проблеме собственных значений // Труды СПИИРАН. — 2013. — Вып. 3(26).
7. Кузнецов Ю.И. Проблема собственных значений симметричной тридиагональной матрицы // Сибирский журнал вычислительной математики. — 2009. — Т. 12, № 4.
8. Иордан В.И. Эффективные методы определения энергетического спектра матриц большой размерности в задачах экспериментальной физики : дисс. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.01. — Барнаул, 2003.