

ПРО ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ НЬЮТОНА ДО ЗНАХОДЖЕННЯ ВЛАСНИХ ЗНАЧЕНЬ НЕЛІНІЙНИХ СПЕКТРАЛЬНИХ ЗАДАЧ

Розглядається ітераційний алгоритм знаходження власних значень нелінійних спектральних задач, який використовує метод Ньютона і нову ефективну чисельну процедуру обчислення ньютонівської поправки. Наведено числові приклади.

При дослідженні кількісних і якісних характеристик розв'язків операторних рівнянь вигляду

$$T(\lambda)y = f$$

з операторнозначною функцією $T : \mathbb{C} \rightarrow X(H)$ (де $X(H)$ – множина лінійних операторів деякого простору H ; $\lambda \in \mathbb{C}$ – спектральний параметр), яка нелінійно залежить від параметра λ , виникають задачі, у яких потрібно знайти ті значення параметра λ , при яких існує нетривіальний розв'язок $y \neq 0$ відповідного однорідного рівняння

$$T(\lambda)y = 0.$$

Методам чисельного розв'язування таких нелінійних спектральних задач присвячена низка робіт (див., наприклад, [2–4, 5, 6, 8, 10, 11] та бібліографію там). На відміну від згаданих робіт, у цій роботі для нелінійної матричної спектральної задачі запропоновано алгоритм знаходження її власних значень як коренів відповідного нелінійного скалярного (детермінантного) рівняння без розкриття самого детермінанта.

1. Нелінійна алгебраїчна задача на власні значення. Нехай $\mathbf{D}(\lambda)$ – квадратна матриця n -го порядку, усі елементи якої є достатньо гладкими (принаймні двічі неперервно диференційовними у дійсному випадку або аналітичними у комплексному випадку) функціями параметра λ у деякій заданій області. Задача полягає у знаходженні таких чисел $\lambda \in \mathbb{C}$, які називаються власними значеннями, і таких векторів $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$, які називаються відповідно лівим та правим власними векторами і які задовольняють рівняння

$$\mathbf{x}^* \mathbf{D}(\lambda) = 0, \quad \mathbf{D}(\lambda) \mathbf{y} = 0. \quad (1)$$

Тут верхній індекс «*» означає спряжене транспонування. Шукані значення λ є одними й тими ж для обох задач (1) і є розв'язками рівняння

$$f(\lambda) \equiv \det \mathbf{D}(\lambda) = 0. \quad (2)$$

Опишемо процес, який дозволяє для визначення ізольованого власного значення неособливої матриці $\mathbf{D}(\lambda)$ застосовувати метод Ньютона, не розкриваючи визначника $\mathbf{D}(\lambda)$. Це означає, що ліва частина рівняння (1) у явному вигляді не задається, але пропонується алгоритм знаходження значення функцій $f(\lambda)$ та $f'(\lambda)$ при фіксованому значенні параметра λ з використанням для цього LU-розкладу матриці $\mathbf{D}(\lambda)$.

2. Метод Ньютона та обчислення похідної детермінанта. Нехай нам відомо наближення λ_k до власного значення, достатнє для застосування методу Ньютона. Покажемо, як знаходити поправку $\Delta\lambda_k = f(\lambda_k)/f'(\lambda_k)$ для побудови послідовних наближень $\{\lambda_n\}_0^\infty$ за методом Ньютона

$$\lambda_{k+1} = \lambda_k - \Delta\lambda_k. \quad (3)$$

Для цього потрібно уміти обчислювати значення функції $f(\lambda)$ та її похідної лише при фіксованих значеннях параметра λ . Це можна зробити за допомогою \mathbf{LU} -розкладу матриці $\mathbf{D}(\lambda)$, тобто розкладу

$$\mathbf{D}(\lambda) = \mathbf{L}(\lambda)\mathbf{U}(\lambda), \quad (4)$$

де $\mathbf{L}(\lambda)$ – нижня трикутна матриця з одиничними діагональними елементами, а $\mathbf{U}(\lambda)$ – верхня трикутна матриця. Тоді

$$f(\lambda) = \det \mathbf{L}(\lambda) \det \mathbf{U}(\lambda) = \prod_{i=1}^n u_{ii}(\lambda).$$

Оскільки елементи квадратної матриці $\mathbf{D}(\lambda)$ (а, отже, й $\mathbf{U}(\lambda)$) є диференційовними функціями за λ , то для будь-яких λ отримуємо, що

$$f'(\lambda) = \sum_{k=1}^n v_{kk}(\lambda) \prod_{i=1, i \neq k}^n u_{ii}(\lambda),$$

де $v_{ii}(\lambda) = u'_{ii}(\lambda)$. Для знаходження значень $v_{ii}(\lambda)$ продиференціюємо (4) за λ . Отримаємо

$$\mathbf{V}(\lambda) = \mathbf{M}(\lambda)\mathbf{U}(\lambda) + \mathbf{L}(\lambda)\mathbf{V}(\lambda),$$

де

$$\mathbf{V}(\lambda) = \mathbf{D}'(\lambda), \quad \mathbf{M}(\lambda) = \mathbf{L}'(\lambda), \quad \mathbf{V}(\lambda) = \mathbf{U}'(\lambda).$$

Отже, для обчислення $f(\lambda_k)$ та $f'(\lambda_k)$ необхідно при фіксованому $\lambda = \lambda_k$ обчислити

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \mathbf{L}\mathbf{U}, \\ \mathbf{V} &= \mathbf{M}\mathbf{U} + \mathbf{L}\mathbf{V}, \end{aligned} \quad (5)$$

звідки

$$\begin{aligned} f(\lambda_k) &= \prod_{i=1}^n u_{ii}, \\ f'(\lambda_k) &= \sum_{k=1}^n v_{kk} \prod_{i=1, i \neq k}^n u_{ii}, \end{aligned} \quad (6)$$

тобто для поправки $\Delta\lambda_k$ отримуємо співвідношення

$$\Delta\lambda_k = \frac{1}{\sum_{k=1}^n \frac{v_{kk}}{u_{kk}}}. \quad (7)$$

Елементи матриць у розкладах (5) можуть бути обчислені за допомогою рекурентних співвідношень

$$\begin{aligned} r &= 1, 2, \dots, n, \\ u_{rk} &= d_{rk} - \sum_{j=1}^{r-1} \ell_{rj} u_{jk}, & k &= r, \dots, n, \\ \ell_{ir} &= \left(d_{ir} - \sum_{j=1}^{r-1} \ell_{ij} u_{jr} \right) \frac{1}{u_{rr}}, & i &= r+1, \dots, n, \\ v_{rk} &= b_{rk} - \sum_{j=1}^{r-1} (m_{rj} u_{jk} + \ell_{rj} v_{jk}), & k &= r, \dots, n, \\ m_{ir} &= \left[b_{ir} - \sum_{j=1}^{r-1} (m_{ij} u_{jr} + \ell_{ij} v_{jr}) - \ell_{ir} v_{rr} \right] \frac{1}{u_{rr}}, & i &= r+1, \dots, n. \end{aligned}$$

Отже, алгоритм можна записати у такому вигляді:

Алгоритм 1

1. Задаємо початкове наближення λ_n до m -го власного значення задачі (1).
 2. **for** $k = 1, 2, \dots$ до досягнення точності **do**
 3. обчислити **LU**-розклад (5)
 4. обчислити $\Delta\lambda_k$ за (7)
 5. обчислити λ_{k+1} за (3)
 6. **end for** k .
-

Зазначимо, що цей алгоритм може стати недійсним, якщо деякий елемент $u_{rr} = 0$. Навіть якщо ділення на нуль і немає, ця версія не завжди є чисельно стійкою. Але алгоритм може бути видозмінений так, щоб його можна було застосовувати завжди і він був чисельно стійким (за умови, звичайно, що матриця **D** у розкладі (5) є невідродженою).

Для уникнення небажаного випадку $u_{rr} = 0$ застосовують низку перестановок рядків (і/або стовпців) матриці **D** з вибором головного елемента (див., наприклад, [7, с. 44]). У цьому випадку розклад (5) запишеться у вигляді

$$\mathbf{PD} = \mathbf{LU},$$

$$\mathbf{PB} = \mathbf{MU} + \mathbf{LV},$$

де **P** – матриця перестановок, причому $\det \mathbf{P} = (-1)^s$, де s – число перестановок (наприклад, рядків). У такому випадку співвідношення (6) запишуться у вигляді

$$f(\lambda_k) = (-1)^s \prod_{i=1}^n u_{ii}, \quad f'(\lambda_k) = (-1)^s \sum_{k=1}^n v_{kk} \prod_{i=1, i \neq k}^n u_{ii}.$$

Цей алгоритм може застосовуватися і для інших методів, які використовують похідні. Зокрема, для алгоритму знаходження початкових наближень (див. [2, 9]), які потім можна використати, наприклад, для того ж таки методу Ньютона.

3. Алгоритм знаходження початкових наближень. В основі алгоритму знаходження початкових наближень до усіх власних значень задачі (1), які знаходяться у деякій області G , є твердження, що впливає з принципу аргумента аналітичної функції (див., наприклад, [1, с. 151]):

Нехай аналітична функція $f(\lambda)$ має в області G з урахуванням кратності m нулів $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ і не має нулів на границі Γ області G . Тоді число t визначається згідно з принципом аргумента

$$t = s_0 = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)} d\lambda \quad (8)$$

та справджуються співвідношення

$$\sum_{j=1}^m (\lambda_j)^k = s_k, \quad k = 1, \dots, t, \quad (9)$$

де

$$s_k = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \lambda^k \frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)} d\lambda, \quad k = 0, 1, \dots \quad (10)$$

Таким чином, знаючи $s_k, k = 1, 2, \dots, t$, можна з системи (10) знайти нулі функції $f(\lambda)$, які знаходяться в області G .

Отже, застосовуючи це твердження до аналітичної функції $f(\lambda) = \det \mathbf{D}(\lambda)$, можемо знайти усі власні значення задачі (1), які належать заданій області G .

Зупинимось на обчислювальних аспектах алгоритму (8)–(10), а саме, на тій його частині, де обчислюються величини s_k , $k = 0, 1, \dots, m$.

Не зменшуючи загальності, як область G виберемо круг $G(\lambda_*, \rho)$ з центром у точці λ_* і радіусом ρ та замінимо інтеграл в (10) якоюсь наближеною квадратурною формулою (наприклад, прямокутників) в N точках на Γ :

$$s_k = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\lambda_j)^k \rho \exp\left(i \frac{2\pi j}{N}\right) \frac{f'(\lambda_j)}{f(\lambda_j)}, \quad \lambda_j = \lambda_* + \rho \exp\left(i \frac{2\pi j}{N}\right). \quad (11)$$

Оскільки в співвідношеннях (11) значення функції $f(\lambda)$ та її похідної обчислюється лише на границі області G , то це можна зробити за допомогою запропонованого алгоритму (5), (6). Тобто, враховуючи (6), для обчислення величин s_k , $k = 0, 1, \dots, m$, отримуємо співвідношення

$$s_k = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left((\lambda_j)^k \rho \exp\left(i \frac{2\pi j}{N}\right) \sum_{r=1}^n \frac{v_{rr}}{u_{rr}} \right). \quad (12)$$

Отже, за допомогою співвідношень (5), (6) і (12) наближено обчислюємо s_k , $k = 1, 2, \dots, m$, – праву частину системи (9). Саму ж систему (9) можна розв'язувати, зокрема, методом Ньютона, як запропоновано в [2]. Для зручності запишемо систему (9) у векторній формі

$$F(\lambda) = s,$$

де $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)$, $s = (s_1, s_2, \dots, s_m)^\top$, $F(\lambda) = (\varphi_1(\lambda), \varphi_2(\lambda), \dots, \varphi_m(\lambda))^\top$,

$$\varphi_k(\lambda) = \sum_{j=1}^m (\lambda_j)^k, \quad k = 1, 2, \dots, m,$$

для якої ітераційний процес методу Ньютона набуде вигляду

$$\lambda^{(j+1)} = \lambda^{(j)} - [F'(\lambda^{(j)})]^{-1} [F(\lambda^{(j)}) - s]. \quad (13)$$

Початкове наближення для ітераційного процесу (13) вибираємо на границі Γ області G , яка за нашими припущеннями є кругом, тобто

$$\lambda_j^{(0)} = \lambda_* + \rho \exp\left(i \frac{2\pi j}{m}\right), \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (14)$$

Отже, алгоритм можна записати у такому вигляді:

Алгоритм 2

1. Визначаємо область G , задаючи λ_* і ρ , а також кількість точок розбиття N границі Γ .
 2. **for** $j = 0, 1, \dots, N$ **do**
 3. обчислити **LU**-розклад (5)
 4. обчислити $m = s_0$ та s_k , $k = 1, 2, \dots, m$, за (12)
 5. **end for** j
 6. Обчислюємо початкові наближення $\lambda_j^{(0)}$ до m власних значень на Γ за (14)
 7. **for** $k = 0, 1, \dots$ до досягнення точності **do**
 8. обчислити $\lambda_j^{(k+1)}$ за (13)
 9. **end for** k .
-

Отже, не маючи ніякої апріорної інформації, крім заданої області, можна за допомогою **алгоритму 2** отримати деякі, взагалі кажучи, грубі наближення до усіх власних значень задачі (1), які належать області G . Якщо точність, з якою отримано власні значення, не є задовільною, то їх можна послідовно уточнити за допомогою алгоритму п. 2, тобто використати їх як початкові наближення для **алгоритму 1**.

4. Числові результати. Як тестовий приклад для апробації запропонованих у роботі алгоритмів розглядали квадратичну спектральну задачу вигляду (1) з матрицею [4]

$$D(\lambda) = \lambda^2 A_0 + \lambda A_1 + A_2,$$

де

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1.00 & 0.17 & -0.25 & 0.54 \\ 0.47 & 1.00 & 0.67 & -0.32 \\ -0.11 & 0.35 & 1.00 & -0.74 \\ 0.55 & 0.43 & 0.36 & 1.00 \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 0.22 & 0.02 & 0.12 & 0.14 \\ 0.02 & 0.14 & 0.04 & -0.06 \\ 0.12 & 0.04 & 0.28 & 0.08 \\ 0.14 & -0.06 & 0.08 & 0.26 \end{pmatrix},$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} -3.047588 & -2.187912 & -1.944900 & -2.824296 \\ -2.650072 & -2.472484 & -2.351516 & -2.105384 \\ -0.745660 & -0.642364 & -1.311776 & -0.185240 \\ -4.050012 & -3.063188 & -2.812192 & -3.779440 \end{pmatrix}.$$

Таблиця 1

Для такої задачі за допомогою **алгоритму 1** для серії початкових наближень були обчислені усі вісім власних значень. Результати розрахунків наведено у табл. 1. У першому стовпчику наведено початкові наближення $\lambda^{(0)}$, у другому – кількість k ітерацій, для яких досягається точність $\varepsilon = 10^{-6}$ обчислення власного значення при заданому початковому наближенні, а у третьому – отримане власне значення λ .

Цю саму задачу використовували для апробації **алгоритму 2**. Спочатку визначали кількість власних значень, які належать певній області G . Для розрахунку області G задавали у вигляді круга $G(\lambda_*, \rho)$ з центром у точці $\lambda_* = 0$ і радіусами $\rho = 0.3, 0.5, 0.7, 1.0, 1.3, 3.0$. Результати розрахунків наведено у табл. 2, у якій для кожного значення ρ подано кількість власних значень, які попадають у задану область, самі власні значення і кількість ітерацій, які необхідні для обчислення власних значень з точністю $\varepsilon = 10^{-4}$.

$\lambda^{(0)}$	k	λ
32.0	26	2.32274
10.0	17	
2.5	5	
1.9	9	0.79670
1.0	7	
0.9	6	
0.7	4	0.63828
0.6	3	
0.5	5	0.24226
0.1	4	
0.01	7	
-0.5	4	-0.37774
-0.7	6	-0.83939
-1.0	5	
2.0	6	
-1.5	6	-1.22347
-2.0	8	
0.0	10	
2.01	4	-2.63538
-2.4	9	

Таблиця 2

$\rho = 0.3$		$\rho = 0.5$		$\rho = 0.7$		$\rho = 1.0$		$\rho = 1.3$		$\rho = 3.0$	
λ	k	λ	k	λ	k	λ	k	λ	k	λ	k
0.2423	2	-0.3777	4	-0.3777	28	0.6383	68	0.2383	25	2.3229	77
		0.2423		0.2435		0.2423		-0.8499		0.7967	
				0.6386		-0.3778		-1.2261		0.6383	
						0.7967		-0.3878		0.2423	
						-0.8394		0.7956		-0.3778	
								0.6408		-0.8394	
										-1.2234	
										-2.6354	

Як уже зазначалося, отримані в результаті роботи *алгоритму 2* наближені значення власних чисел $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ не завжди задовольняють потрібний критерій точності. Для їхнього уточнення можна використати *алгоритм 1*, взявши їх за початкові наближення. У розглядуваному випадку для досягнення точності потрібно лише дві ітерації для кожного з восьми власних значень, а уточнені власні значення повністю співпадають зі значеннями, наведеними у табл. 1 (третьій стовпчик).

1. Бицадзе А. В. Основы теории аналитических функций комплексного переменного. – Москва: Наука, 1969. – 239 с.
2. Картышов С. В. Численный метод решения задачи на собственные значения с нелинейным вхождением спектрального параметра для разреженных матриц // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 1989. – **29**, № 12. – С. 1898–1903.
3. Конькова Т. Я., Кублановская В. Н., Савинова Л. П. К решению нелинейной спектральной задачи для матрицы // Зап. науч. семинара ЛОМИ АН СССР. – 1976. – **58**. – С. 54–66.
4. Кублановская В. Н. К спектральной задаче для полиномиальных пучков матриц // Зап. науч. семин. ЛОМИ АН СССР. – 1978. – **80**. – С. 83–97.
5. Подлевський Б. М. Чисельний метод розв'язування одного класу нелінійних спектральних задач // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2001. – **44**, № 2. – С. 34–38.
6. Подлевський Б. М. Числові методи розв'язування узагальнених спектральних задач для поліноміальних пучків самоспряжених операторів: Дис. ... канд. фіз.-мат. наук. – Львів, 1995. – 111 с.
7. Райс Дж. Матричные вычисления и математическое обеспечение. – Москва: Мир, 1984. – 264 с.
8. Anselone P. M., Rall L. B. The solution of the characteristic value-vector problems by Newton's method // Numer. Math. – 1968. – **11**, No. 1. – P. 38–45.
9. Delves L. M., Lyness J. N. A numerical method for locating the zeros of analytic function // Math. Comput. – 1967. – **100**. – P. 543–561.
10. Neumaier A. Residual inverse iteration for the nonlinear eigenvalue problem // SIAM J. Numer. Anal. – 1985. – **22**, No. 5. – P. 914–923.
11. Ruhe A. Algorithms for the nonlinear eigenvalue problem // SIAM. J. Numer. Anal. – 1973. – **10**, No. 4. – P. 674–689.

О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА НЬЮТОНА К НАХОЖДЕНИЮ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ НЕЛИНЕЙНЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАДАЧ

Рассматривается итерационный алгоритм нахождения собственных значений нелинейных спектральных задач, использующий метод Ньютона и новую эффективную численную процедуру определения ньютоновской поправки. Приведены примеры.

ON APPLICATION OF NEWTON'S METHOD TO DETERMINATION OF EIGENVALUES OF NON-LINEAR SPECTRAL PROBLEMS

The iterative algorithm for determination of eigenvalues of non-linear spectral problem using Newton's method and new efficient numerical procedure for calculation of the Newtonian correction is considered.

Ін-т прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів

Одержано
23.05.05