СИММЕТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРАЛЬНАЯ ПРОБЛЕМА, 2 серия

Бибердорф Э.А.

Пример 1

$$S_k = \begin{pmatrix} d & b & & & 0 \\ b & d & b & & \\ & b & d & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & b \\ 0 & & & b & d \end{pmatrix}, \qquad \begin{array}{l} D_1(\lambda) = d - \lambda, \\ D_2(\lambda) = (d-\lambda)^2 - b^2, \\ \dots \\ D_k(\lambda) = (d-\lambda)D_{k-1}(\lambda) - b^2 D_{k-2}(\lambda). \end{array}$$

Разностные уравнения

$$D_k(\lambda) - (d-\lambda)D_{k-1}(\lambda) - b^2 D_{k-2}(\lambda) = 0$$

начальные значения:

$$\begin{array}{l} D_1(\lambda) = d - \lambda, \\ D_2(\lambda) = (d-\lambda)^2 - b^2. \end{array}$$

Решение разностных уравнений

$$au_{k+1} + bu_k + cu_{k-1} = 0 \quad \Rightarrow \quad u_k = \alpha q_1^k + \beta q_2^k,$$

α, $\beta = \mathrm{const}$; q_1 и q_2 – корни характ. ур-я

$$aq^2 + bq + c = 0.$$

В нашем случае характ. ур-е:

$$q^2 - (d - \lambda)q + b^2 = 0,$$

его корни

$$q_{1,2} = |b| \left[(d - \lambda)/2|b| \pm i\sqrt{1 - ((d - \lambda)/2|b|)^2} \right]$$

Т.к. λ – с.зн. S_k $\quad \Rightarrow \quad d - 2|b| \le \lambda \le d + 2|b| \quad \Rightarrow \quad |d - \lambda|/2|b| \le 1 \quad \Rightarrow$

$$q_{1,2} = |b|(\cos\varphi \pm i \sin\varphi)$$

Решение разностных уравнений

$$u_k = \alpha q_1^k + \beta q_2^k, \qquad q_{1,2} = |b|(\cos\varphi \pm i \sin\varphi),$$

где $\cos\varphi = (d-\lambda)/2|b| \Rightarrow$

$$D_k = (\alpha+\beta)|b|^k \cos k\varphi + i(\alpha-\beta)|b|^k \sin k\varphi$$

Из начальных условий

$$\begin{array}{l} D_1 = d-\lambda = 2|b|\cos\varphi, \\ D_2 = (d-\lambda)^2 - b^2 = b^2(4\cos^2\varphi - 1), \end{array} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{cases} \alpha+\beta = 1, \\ i(\alpha-\beta) = \cos\varphi/\sin\varphi. \end{cases}$$

$$D_k = |b|^k(\cos k\varphi + \cos\varphi \sin k\varphi/\sin\varphi) = |b|^k \sin(k+1)\varphi/\sin\varphi.$$

λ с.зн. $S_k \Leftrightarrow D_k(\lambda) = 0$, т. е. $\varphi = n\pi/(k+1)$ $(n = 1, 2, \ldots, k)$
Из $D_1 = d-\lambda = 2|b|\cos\varphi \Rightarrow (d-\lambda)/2|b| = \cos n\pi/(k+1)$.

$$\lambda_n = d - 2|b|\cos\frac{n\pi}{k+1} \quad (n = 1, 2, \ldots, k)$$

Численный пример

При $d = 0, b = 1/2$ $D_k(-\lambda)$ – полиномы Чебышева второго рода

n	$\lambda_n^{[c]}(S_{10})$	$\lambda_n(S_{10})$	δ
1	-0.959492973614496	-0.959492973614497	10^{-16}
2	-0.841253532831179	-0.841253532831181	10^{-15}
3	-0.654860733945285	-0.654860733945285	10^{-16}
4	-0.415415013001885	-0.415415013001886	10^{-15}
5	-0.142314838273284	-0.142314838273285	10^{-16}
6	0.142314838273284	0.142314838273285	10^{-16}
7	0.415415013001885	0.415415013001886	10^{-15}
8	0.654860733945286	0.654860733945284	10^{-15}
9	0.841253532831180	0.841253532831181	10^{-16}
10	0.959492973614496	0.959492973614497	10^{-16}
ϵ_λ	$5.77316 \cdot 10^{-15}$		

Пример2: оператор Лапласа

Задача на собственные значения оператора Лапласа с уловиями Дирихле

$$\triangle u = \lambda u, \qquad u|_{\Gamma_D} = 0$$

в области $D = [0 \leq x, y \leq 1]$
Дискретная модель:

$$U = R^s, \;\; s = (M-1)\times(N-1), \;\; u_{mn} = u\left(\frac{m}{M}, \frac{n}{N}\right)$$

Шаги дискретизации: $h_x = \dfrac{1}{M}, \qquad h_y = \dfrac{1}{N}$

Дискретный оператор Лапласа $L : U \to U$

$$v_{mn} = Lu_{mn} = \frac{u_{m-1,n} - 2u_{m,n} + u_{m+1,n}}{h_x^2} + \frac{u_{m,n-1} - 2u_{m,n} + u_{m,n+1}}{h_y^2},$$

Граничные условия:

$$u_{0n} = 0, \;\; u_{m0} = 0, \;\; u_{Mn} = 0, \;\; u_{mN} = 0.$$

Ортонормированный базис собственных функций

Собственные значения

$$\lambda^{(k,l)} = -4M^2 \sin^2 \frac{k\pi}{2M} - 4N^2 \sin^2 \frac{l\pi}{2N}$$

Собственные функции

$$u^{(k,l)} = 2 \sin \frac{k\pi m}{M} \sin \frac{l\pi n}{N}, \qquad (1 \le k \le M-1, \;\; 1 \le l \le N-1)$$

Упражнение: проверить равенство

$$Lu^{(k,l)} = \left(-4M^2 \sin^2 \frac{k\pi}{2M} - 4N^2 \sin^2 \frac{l\pi}{2N} \right) u^{(k,l)}$$

Задача в векторно-матричной форме

Пусть $M = N$, $\triangle = h_x = h_y = 1/N \Rightarrow$ аппроксимация ур-я

$$\frac{u_{m-1,n} - 2u_{m,n} + u_{m+1,n}}{\triangle^2} + \frac{u_{m,n-1} - 2u_{m,n} + u_{m,n+1}}{\triangle^2} = \lambda u_{m,n}$$

$$Au = \lambda u, \qquad A = \begin{pmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ C_1 & B_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & C_{N-3} & B_{N-2} & C_{N-2} \\ & & & C_{N-2} & B_{N-1} \end{pmatrix}$$

$$B_n = \begin{pmatrix} \frac{-4}{\triangle^2} & \frac{1}{\triangle^2} & & & \\ \frac{1}{\triangle^2} & \frac{-4}{\triangle^2} & \frac{1}{\triangle^2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \frac{1}{\triangle^2} & \frac{-4}{\triangle^2} & \frac{1}{\triangle^2} \\ & & & \frac{1}{\triangle^2} & \frac{-4}{\triangle^2} \end{pmatrix}, \qquad C_k = \begin{pmatrix} \frac{1}{\triangle^2} & & & & \\ & \frac{1}{\triangle^2} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \frac{1}{\triangle^2} & \\ & & & & \frac{1}{\triangle^2} \end{pmatrix}$$

Результаты счета

n	$\lambda_n^{[c]}(A)$	$\lambda_n(A)$	δ
1	-372.5898981088739	-372.5898981088741	10^{-16}
2	-345.3969496365928	-345.3969496365929	10^{-16}
3	-345.3969496365928	-345.3969496365929	10^{-16}
4	-318.2040011643115	-318.2040011643117	10^{-16}
5	-306.1020005821561	-306.1020005821559	10^{-16}
6	-306.1020005821561	-306.1020005821559	10^{-16}
7	-278.9090521098751	-278.9090521098746	10^{-16}
8	-278.9090521098744	-278.9090521098746	10^{-16}
9	-262.4878975267180	-262.4878975267182	10^{-16}
10	-262.4878975267180	-262.4878975267182	10^{-16}
11	-239.6141030554378	-239.6141030554376	10^{-16}
12	-235.2949490544369	-235.2949490544370	10^{-16}
13	-235.2949490544369	-235.2949490544370	10^{-16}
14	-223.1929484722815	-223.1929484722812	10^{-15}
15	-223.1929484722815	-223.1929484722812	10^{-15}
16	-196.0000000000003	-196.0000000000000	10^{-15}
17	-196.0000000000003	-196.0000000000000	10^{-15}
18	-196.0000000000003	-196.0000000000000	10^{-15}
19	-195.9999999999996	-196.0000000000000	10^{-15}
20	-195.9999999999996	-196.0000000000000	10^{-15}
21	-195.9999999999996	-196.0000000000000	10^{-15}
22	-168.8070515277184	-168.8070515277188	10^{-15}
23	-168.8070515277184	-168.8070515277188	10^{-15}

$$(M-1)=(N-1)=6$$

Результаты счета

24	-156.7050509455630	-156.7050509455629	10^{-16}
25	-156.7050509455630	-156.7050509455629	10^{-16}
26	-152.3858969445621	-152.3858969445623	10^{-15}
27	-129.5121024732819	-129.5121024732817	10^{-15}
28	-129.5121024732819	-129.5121024732817	10^{-15}
29	-113.0909478901255	-113.0909478901252	10^{-15}
30	-113.0909478901255	-113.0909478901252	10^{-15}
31	-85.89799941784440	-85.89799941784410	10^{-15}
32	-85.89799941784374	-85.89799941784410	10^{-15}
33	-73.79599883568837	-73.79599883568822	10^{-15}
34	-46.60305036340722	-46.60305036340703	10^{-15}
35	-46.60305036340722	-46.60305036340703	10^{-15}
36	-19.41010189112606	-19.41010189112585	10^{-14}
ϵ	$1.91265\,10^{-11}$		

Спектр кососимметрических матриц

Кососимметрические матрицы:

$$A^* = -A$$

Диагональные элементы кососимметрических матриц равны нулю:

$$a_{ii} = -a_{ii} = 0.$$

Lemma

Спектр кососимметрических матриц состоит из мнимых чисел:

$$\lambda(A) = \pm i|\lambda|$$

Доказательство. Пусть $\lambda(A) = \lambda = a + ib$. Тогда

$$\lambda(x, x) = (\lambda x, x) = (Ax, x) = (x, A^* x) = (x, -Ax) = (x, -\lambda x) = -\bar{\lambda}(x, x)$$

То есть $a + ib = -a + ib$, что возможно только когда

$$\mathrm{Re}\, \lambda(A) = 0$$

Что и требовалось доказать.

Трехдиагонализация

По полной аналогии с алгоритмом упрощения симметрических матриц можно привести кососимметрическую матрицу к трехдиагональному виду.

$$\mathrm{PAP}^* = \mathrm{B} = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{b}_2 & & 0 \\ -\mathrm{b}_2 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \mathrm{b}_\mathrm{n} \\ 0 & & -\mathrm{b}_\mathrm{n} & 0 \end{pmatrix}$$

При этом собственные значения и векторы матриц A и B связаны соотношениями

$$\mathrm{Av} = \lambda \mathrm{v}, \quad \mathrm{Bw} = \lambda \mathrm{w}, \quad \mathrm{w} = \mathrm{Pv}.$$

Сведение к симметрическому случаю (Принцип «выливания воды из чайника»)

Распишем поэлементно равенство $\mathrm{B}\mathrm{w} = \lambda \mathrm{w}$, учитывая, что
$\lambda = \mathrm{i}\mu, \qquad \mu \in \mathbb{R}$.
Комплекснозначный собственный вектор $\mathrm{w} = \mathrm{u} + \mathrm{i}\mathrm{v}$
Итак

$$\mathrm{B}(\mathrm{u} + \mathrm{i}\mathrm{v}) = \mathrm{i}\mu(\mathrm{u} + \mathrm{i}\mathrm{v}).$$

Поэлементно это равенство выглядит следующим образом:

$$\mathrm{b}_2(\mathrm{u}_2 + \mathrm{i}\mathrm{v}_2) = \mathrm{i}\mu(\mathrm{u}_1 + \mathrm{i}\mathrm{v}_1)$$

$$-\mathrm{b}_2(\mathrm{u}_1 + \mathrm{i}\mathrm{v}_1) + \mathrm{b}_3(\mathrm{u}_3 + \mathrm{i}\mathrm{v}_3) = \mathrm{i}\mu(\mathrm{u}_2 + \mathrm{i}\mathrm{v}_2)$$

$$-\mathrm{b}_\mathrm{k}(\mathrm{u}_{\mathrm{k}-1} + \mathrm{i}\mathrm{v}_{\mathrm{k}-1}) + \mathrm{b}_{\mathrm{k}+1}(\mathrm{u}_{\mathrm{k}+1} + \mathrm{i}\mathrm{v}_{\mathrm{k}+1}) = \mathrm{i}\mu(\mathrm{u}_\mathrm{k} + \mathrm{i}\mathrm{v}_\mathrm{k})$$

$$-\mathrm{b}_\mathrm{N}(\mathrm{u}_{\mathrm{n}-1} + \mathrm{i}\mathrm{v}_{\mathrm{n}-1}) = \mathrm{i}\mu(\mathrm{u}_\mathrm{n} + \mathrm{i}\mathrm{v}_\mathrm{n})$$

Сведение к симметрическому случаю

$B(u+iv) = i\mu(u+iv)$ приравниваем отдельно вещественные и мнимые части равенства:

$$\begin{pmatrix} 0 & b_2 & & 0 \\ -b_2 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_n \\ 0 & & -b_n & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 0 & b_2 & & 0 \\ -b_2 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_n \\ 0 & & -b_n & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}$$

То есть

$$Bv = \mu u, \qquad -Bu = B^* u = \mu v$$

Сведение к симметрическому случаю

$$\mathrm{B}\mathrm{v} = \mu\mathrm{u}, \qquad -\mathrm{B}\mathrm{u} = \mathrm{B}^*\mathrm{u} = \mu\mathrm{v}$$

Составим из векторов u и v вектор в два раза большего размера, тогда объединение двух равенств представляет собой спектральную задачу для симметричной матрицы:

$$\mathcal{B}\begin{pmatrix} \mathrm{u} \\ \mathrm{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{B} \\ \mathrm{B}^* & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{u} \\ \mathrm{v} \end{pmatrix} = \mu\begin{pmatrix} \mathrm{u} \\ \mathrm{v} \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{B} = \mathcal{B}^*$$

Трехдиагонализация с помощью перестановок

Упражнение: Проверить, что:

$$\Pi\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \Pi\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \\ --- \\ v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ u_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ --- \\ u_1 \\ v_2 \\ u_3 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

Замечание: преобразование производится абсолютно точно.

$$\Pi\mathcal{B}\Pi^* = \begin{pmatrix}
0 & -b_2 & & & & & & & & \\
-b_2 & 0 & b_3 & & & & & & & \\
 & b_3 & \ddots & \ddots & & & & & & \\
 & & \ddots & 0 & -b_n & & & & & \\
 & & & -b_n & 0 & 0 & & & & \\
 & & & & 0 & 0 & b_2 & & & \\
 & & & & & b_2 & 0 & -b_3 & & \\
 & & & & & & -b_3 & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & & & \ddots & 0 & b_n \\
 & & & & & & & & b_n & 0
\end{pmatrix}$$

Сингулярные числа произвольных матриц

Сингулярное разложение $A = U\Sigma V^*$, где $UU^* = I$, $VV^* = I$, $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$, $\sigma_j \geq 0$.
Пусть u_j,v_j – столбцы соответственно матриц U и V. Тогда из сингулярного разложения следуют равенства

$$Av_j = \sigma_j u_j, \qquad A^* u_j = \sigma_j v_j.$$

При этом σ_j называются сингулярными числами, а u_j и v_j соответственно левыми и правыми сингулярными векторами матрицы A.

Сведение к симметрической спектральной задаче

Распространенный способ $\mathrm{A}^*\mathrm{A} = \mathrm{V}\Sigma^2\mathrm{V}^*$,
то есть $\sigma_\mathrm{j}^2(\mathrm{A}) = \lambda_\mathrm{j}(\mathrm{A}^*\mathrm{A})$.
Замечание: способ недостаточно достоверен для матриц близких к вырожденной.
Другой способ:

$$\mathcal{A}\begin{pmatrix} \mathrm{u} \\ \mathrm{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{A} \\ \mathrm{A}^* & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{u} \\ \mathrm{v} \end{pmatrix} = \sigma\begin{pmatrix} \mathrm{u} \\ \mathrm{v} \end{pmatrix}$$

Упражнение: Показать, что взаимосвязь спектра матрицы $\mathcal{A}$ и сингулярных чисел матрицы A выражается формулой

$$\lambda(\mathcal{A}) = \pm\sigma(\mathrm{A}).$$

Сведение к симметрической спектральной задаче

Любая квадратная матрица может быть ортогональными преобразованиями P и Q приведена к двухдиагональному виду $PAQ = D$.

Упражнение: Показать, что сингулярные числа матриц A и D совпадают, а выражения для сингулярных векторов имеют вид $u_D = Pu_A$ – для левых векторов и $v_D = Q^* v_A$ – для правых.

Т.о. задача сводится к вычислению собственных значений и векторов матрицы

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} 0 & D \\ D^* & 0 \end{pmatrix},$$

где

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & & & 0 \\ & d_2 & b_3 & & & \\ & & d_3 & b_4 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & d_{n-1} & b_n \\ 0 & & & & & d_n \end{pmatrix}.$$

Трехдиагонализация

Упражнение: Проверить, что:

$$\Pi\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \Pi\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \\ v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ u_1 \\ v_2 \\ u_2 \\ \vdots \\ v_n \\ u_n \end{pmatrix},$$

$$\Pi\mathcal{D}\Pi^* = \mathcal{S} = \begin{pmatrix} 0 & d_1 & & & & 0 \\ d_1 & 0 & b_2 & & & \\ & b_2 & 0 & d_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_n & 0 & d_n \\ 0 & & & & d_n & 0 \end{pmatrix}.$$

Следствия теоремы Вейля

Theorem

Пусть A и $\widetilde{A} = A + \triangle A$ кососимметрические матрицы одинакового размера, причем A имеет собственные значения $i\mu_j$: $\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_n$, а $\widetilde{A} = A + \triangle A$ – собственные значения $i\widetilde{\mu}_j$: $\widetilde{\mu}_1 \leq \widetilde{\mu}_2 \leq \dots \leq \widetilde{\mu}_n$. Тогда справедливо неравенство

$$|\widetilde{\mu}_j - \mu_j| \leq ||\triangle A||.$$

Theorem

Пусть A и $\widetilde{A} = A + \triangle A$ произвольные матрицы одинакового размера, причем A имеет сингулярные числа $\sigma_1 \leq \sigma_2 \leq \dots \leq \sigma_n$, а $\widetilde{A} = A + \triangle A$ – сингулярные числа $\widetilde{\sigma}_1 \leq \widetilde{\sigma}_2 \leq \dots \leq \widetilde{\sigma}_n$. Тогда справедливо неравенство

$$|\widetilde{\sigma}_j - \sigma_j| \leq ||\triangle A||.$$

Результаты вычислений

Пусть элементы главной диагонали $\mathrm{d_i} = 1$, а элементы побочной диагонали $\mathrm{b_i} = 2$.

$\mu = \sigma_{\mathsf{max}}/\sigma_{\mathsf{min}}$ – число обусловленности

n	σ_1	σ_n	$\mu(D_n)$
6	$2.34619\,10^{-2}$	2.91846	$1.24392\,10^{2}$
12	$3.66211\,10^{-4}$	2.97841	$8.13304\,10^{3}$
18	$5.72205\,10^{-6}$	2.99022	$5.22579\,10^{5}$
24	$8.94070\,10^{-8}$	2.99445	$3.34923\,10^{7}$
30	$1.39699\,10^{-9}$	2.99643	$2.14493\,10^{9}$
36	$2.18336\,10^{-11}$	2.99750	$1.37324\,10^{11}$

Собственный вектор симметричной матрицы

$$T = \begin{pmatrix} d_1 & c_2 & & 0 \\ b_2 & d_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & c_n \\ 0 & & b_n & d_n \end{pmatrix}, \qquad b_j c_j > 0$$

Последовательность Штурма:

$$\begin{aligned}
&\mathcal{P}_0(\lambda) - (d_1 - \lambda) + |c_2|/\mathcal{P}_1(\lambda) = 0, \\
&|b_2|\mathcal{P}_1(\lambda) - (d_2 - \lambda) + |c_3|/\mathcal{P}_2(\lambda) = 0, \\
&\ldots \\
&|b_{n-1}|\mathcal{P}_{n-2}(\lambda) - (d_{n-1} - \lambda) + |c_n|/\mathcal{P}_{n-1}(\lambda) = 0, \\
&|b_M|\mathcal{P}_{n-1}(\lambda) - (d_n - \lambda) + 1/\mathcal{P}_n(\lambda) = 0.
\end{aligned}$$

Левосторонняя последовательность Штурма

Решение системы, удовлетворяющее левому краевому условию $\mathcal{P}_0(\lambda) = 0$, называется левосторонней рациональной последовательностью Штурма для трехдиагональной матрицы T и обозначается $\mathcal{P}_0^{(+)}(\lambda), \mathcal{P}_1^{(+)}(\lambda), \ldots, \mathcal{P}_n^{(+)}(\lambda)$:

$$\begin{aligned}
&\mathcal{P}_0^{(+)}(\lambda) = 0, \\
&\mathcal{P}_j^{(+)}(\lambda) = \frac{|c_{j+1}|}{d_j - \lambda - |b_j|\mathcal{P}_{j-1}^{(+)}(\lambda)} \qquad (1 \le j \le n-1), \\
&\mathcal{P}_n^{(+)}(\lambda) = \frac{1}{d_M - \lambda - |b_n|\mathcal{P}_{n-1}^{(+)}(\lambda)}.
\end{aligned}$$

Правосторонняя последовательность Штурма

Правосторонней рациональной последовательностью Штурма для матрицы T называют решение системы
$\mathcal{P}_0^{(-)}(\lambda), \mathcal{P}_1^{(-)}(\lambda), \ldots, \mathcal{P}_n^{(-)}(\lambda)$,
удовлетворяющее правому краевому условию $\mathcal{P}_n^{(-)}(\lambda) = +\infty$:

$$\mathcal{P}_n^{(-)}(\lambda) = +\infty,$$
$$\mathcal{P}_j^{(-)}(\lambda) = \frac{d_{j+1} - \lambda - |c_{j+2}|/\mathcal{P}_{j+1}^{(-)}(\lambda)}{|b_{j+1}|} \qquad (n - 1 \geq j \geq 1),$$
$$\mathcal{P}_0^{(-)}(\lambda) = d_1 - \lambda - |c_2|/\mathcal{P}_1^{(-)}(\lambda)\ .$$

Двусторонняя последовательность Штурма

Так как

$$\mathcal{P}_{\mathrm{j}}^{(+)}(\lambda) = \frac{|\mathrm{c}_{\mathrm{j}+1}|\mathrm{D}_{\mathrm{j}-1}(\lambda)}{\mathrm{D}_{\mathrm{j}}(\lambda)},$$

где $\mathrm{D}_{\mathrm{j}}(\lambda)$ – определитель j-го порядка, то верны следующие утверждения:

1) если $\lambda = \lambda_{\mathrm{j}}(\mathrm{T})$ – собственное значение матрицы T, то левосторонняя последовательность $\mathcal{P}_0^{(+)}(\lambda)$, $\mathcal{P}_1^{(+)}(\lambda), \ldots, \mathcal{P}_{\mathrm{n}}^{(+)}(\lambda)$ является также правосторонней последовательностью Штурма.

2) если левосторонняя последовательность является также правосторонней $\mathcal{P}_{\mathrm{n}}^{(+)}(\lambda) = +\infty$, то λ – собственное значение матрицы T.

Последовательность $\mathcal{P}_0(\lambda), \mathcal{P}_1(\lambda), \ldots, \mathcal{P}_{\mathrm{n}}(\lambda)$, удовлетворяющая одновременно двум краевым условиям

$$\mathcal{P}_0(\lambda) = 0, \qquad \mathcal{P}_{\mathrm{n}}(\lambda) = +\infty,$$

называется двусторонней рациональной последовательностью Штурма.

Собственный вектор симметричной матрицы

Двусторонняя последовательность

$$-(d_1 - \lambda) + \frac{|c_2|}{\mathcal{P}_1(\lambda)} = 0,$$

$$\dots$$

$$|b_j|\mathcal{P}_{j-1}(\lambda) - (d_j - \lambda) + \frac{|c_{j+1}|}{\mathcal{P}_j(\lambda)} = 0,$$

$$\dots$$

$$|b_n|\mathcal{P}_{n-1}(\lambda) - (d_n - \lambda) = 0.$$

Покомпонентная запись $Tv = \lambda v$

$$-(d_1 - \lambda) - \frac{c_2 v_2}{v_1} = 0,$$

$$\dots$$

$$-b_j \frac{v_{j-1}}{v_j} - (d_j - \lambda) - \frac{c_{j+1} v_{j+1}}{v_j} = 0$$

$$\dots$$

$$-b_n \frac{v_{n-1}}{v_n} - (d_n - \lambda) = 0.$$

$$2 \le j \le n - 1$$

Собственный вектор симметричной матрицы

Двусторонняя последовательность

$$
\begin{aligned}
&-(d_1-\lambda)+\frac{|c_2|}{\mathcal{P}_1(\lambda)}=0,\\
&\dots\\
&|b_j|\mathcal{P}_{j-1}(\lambda)-(d_j-\lambda)+\frac{|c_{j+1}|}{\mathcal{P}_j(\lambda)}=0,\\
&\dots\\
&|b_n|\mathcal{P}_{n-1}(\lambda)-(d_n-\lambda)=0.
\end{aligned}
$$

Покомпонентная запись $Tv=\lambda v$

$$
\begin{aligned}
&-(d_1-\lambda)-\frac{c_2v_2}{v_1}=0,\\
&\dots\\
&-b_j\frac{v_{j-1}}{v_j}-(d_j-\lambda)-\frac{c_{j+1}v_{j+1}}{v_j}=0\\
&\dots\\
&-b_n\frac{v_{n-1}}{v_n}-(d_n-\lambda)=0.
\end{aligned}
$$

$$2\le j\le n-1$$

$$\mathcal{P}_j(\lambda_k)=\frac{-\operatorname{sign}(c_{j+1})v_j}{v_{j+1}}$$

Собственный вектор симметричной матрицы

Таким образом, для определения отношений компонент собственного вектора v, соответствующего определенному $\lambda = \lambda_{\mathrm{k}}$ собственному значению матрицы T, достаточно вычислить левосторонюю последовательность Штурма матрицы T, которая одновременно является двусторонней.

Вычисление двусторонней последовательности

$$S = \begin{pmatrix} d_1 & b_2 & & & & 0 \\ b_2 & d_2 & b_3 & & & \\ & b_3 & d_3 & b_4 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_{n-1} & d_{n-1} & b_n \\ 0 & & & & b_n & d_n \end{pmatrix}, \qquad b_j \neq 0$$

$$\lambda_k^{(-)} \le \lambda_k(S) \le \lambda_k^{(+)}$$

$$\begin{aligned}
&\mathcal{P}_1^{(+)[c]} = |b_2| \overline{\oslash} (d_1 \underline{\ominus}_0 \lambda_k^{(+)}), \\
&\ldots \\
&\mathcal{P}_j^{(+)[c]} = |b_{j+1}| \overline{\oslash} (d_j \underline{\ominus}_0 \lambda_k^{(+)} \underline{\ominus}_0 |b_j| \overline{\otimes} \mathcal{P}_{j-1}^{(+)[c]}, \\
&\ldots \\
&\mathcal{P}_n^{(+)[c]} = 1 \overline{\oslash} (d_n \underline{\ominus}_0 \lambda_k^{(+)} \underline{\ominus}_0 |b_n| \overline{\otimes} \mathcal{P}_{n-1}^{(+)[c]}).
\end{aligned}$$

Вычисление двусторонней последовательности

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{P}_{n-1}^{(-)\,[c]} = (d_n \overline{\ominus}_0 \lambda_k^{(-)}) \overline{\oslash} |b_n|,\\
&\ldots\\
&\mathcal{P}_{j}^{(-)\,[c]} = (d_{j+1} \overline{\ominus}_0 \lambda_k^{(-)} \overline{\ominus}_0 |b_{j+2}| \underline{\oslash} \mathcal{P}_{j+1}^{(-)\,[c]}) \overline{\oslash} |b_{j+1}|,\\
&\ldots\\
&\mathcal{P}_{0}^{(-)\,[c]} = d_1 \overline{\ominus}_0 \lambda_k^{(-)} \overline{\ominus}_0 |b_2| \underline{\oslash} \mathcal{P}_{1}^{(-)\,[c]}.
\end{aligned}
$$

Lemma

Пусть $\varepsilon_1 \geq 2\gamma \max\left\{ \sqrt[4]{\varepsilon_0}\,,\ \sqrt[4]{\dfrac{2}{\varepsilon_\infty}} \right\},\ \dfrac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |d_i| \leq 1, \quad \dfrac{\varepsilon_1}{\gamma} \leq |b_j| \leq 1,$ $-3 \leq \lambda \leq 3$. Тогда вычисления последовательности Штурма по формулам не приводят к ПЕРЕПОЛНЕНИЯМ:

$$
\varepsilon_0 < \left| \mathcal{P}_j^{(+)\,[c]} \right| < \varepsilon_\infty, \qquad \varepsilon_0 < \left| \mathcal{P}_j^{(-)\,[c]} \right| < \varepsilon_\infty.
$$

Тригонометрическая параметризация

Если $\mathrm{p}_{\mathrm{j}}^{(+)}$ – число неположительных элементов среди $\mathcal{P}_1^{(+)}, \mathcal{P}_2^{(+)}, \ldots, \mathcal{P}_{\mathrm{j}}^{(+)}$, то последовательность

$$\varphi_{\mathrm{j}}^{(+)} = \mathrm{p}_{\mathrm{j}}^{(+)}\pi + \arctan \mathcal{P}_{\mathrm{j}}^{(+)}$$

называется левосторонней тригонометрической последовательностью Штурма.

Пусть q_{j} – число неположительных элементов среди $\mathcal{P}_{\mathrm{j+1}}^{(-)}, \mathcal{P}_{\mathrm{j+2}}^{(-)}, \ldots, \mathcal{P}_{\mathrm{n-1}}^{(-)}$ и $\mathrm{p}_{\mathrm{j}}^{(-)} = \mathrm{n} - 1 - \mathrm{q}_{\mathrm{j}}$, тогда последовательность

$$\varphi_{\mathrm{j}}^{(-)} = \mathrm{p}_{\mathrm{j}}^{(-)}\pi + \arctan \mathcal{P}_{\mathrm{j}}^{(-)}$$

называется правосторонней тригонометрической последовательностью Штурма.

Свойства тригонометрических последовательностей

График $(0,\varphi_0)$, $(1,\varphi_1)$, $(2,\varphi_2)$,…, $(n-1,\varphi_{n-1})$, (n,φ_n). Благодаря монотонности графики последовательностей $\varphi_j^{(+)}(\lambda_k^{(+)})$ и $\varphi_j^{(-)}(\lambda_k^{(-)})$ лежат выше графика $\varphi_j(\lambda_n)$.

Lemma (о пересечении графиков)

Пусть $\lambda_k^{(-)} \le \lambda_k \le \lambda_k^{(+)}$. Тогда

$$\varphi_0^{(-)}(\lambda_k^{(-)}) \ge \varphi_0^{(+)}(\lambda_k^{(+)}), \qquad \varphi_n^{(+)}(\lambda_k^{(+)}) \ge \varphi_n^{(-)}(\lambda_k^{(-)}).$$

Пересечение графиков означает, что для некоторого J имеют место неравенства

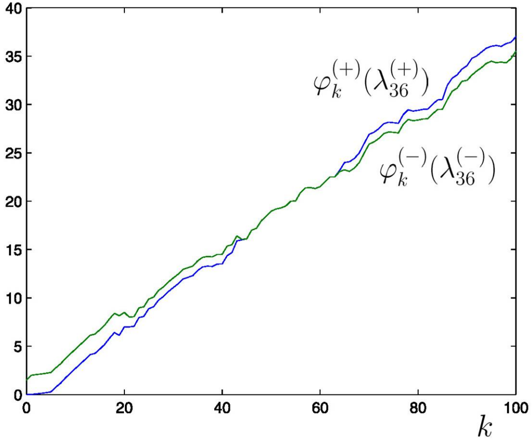
$$\varphi_{J-1}^{(+)}(\lambda_k^{(+)}) \le \varphi_{J-1}^{(-)}(\lambda_k^{(-)}), \qquad \varphi_J^{(+)}(\lambda_k^{(+)}) \ge \varphi_J^{(-)}(\lambda_k^{(-)}).$$

Приближенная двусторонняя последовательность

$$\mathcal{P}_1^{(+)}, \mathcal{P}_2^{(+)}, \dots, \mathcal{P}_{J-1}^{(+)}, \mathcal{P}_J^{(-)}, \mathcal{P}_{J+1}^{(-)}, \dots, \mathcal{P}_{n-1}^{(-)}.$$

Приближенная двусторонняя последовательность

$$\varphi_{\mathrm{J}-1}^{(+)}(\lambda_{\mathrm{k}}^{(+)}) \leq \varphi_{\mathrm{J}-1}^{(-)}(\lambda_{\mathrm{k}}^{(-)}), \qquad \varphi_{\mathrm{J}}^{(+)}(\lambda_{\mathrm{k}}^{(+)}) \geq \varphi_{\mathrm{J}}^{(-)}(\lambda_{\mathrm{k}}^{(-)}).$$



$$\mathcal{P}_1^{(+)}, \mathcal{P}_2^{(+)}, \ldots, \mathcal{P}_{\mathrm{J}-1}^{(+)}, \mathcal{P}_{\mathrm{J}}^{(-)}, \mathcal{P}_{\mathrm{J}+1}^{(-)}, \ldots, \mathcal{P}_{\mathrm{n}-1}^{(-)}.$$

Алгоритм

Дано: трехдиагональная симметричная матрица S размера n, k – номер собственного значения матрицы $1 \le k \le n$.

1. **Определение границ собственного значения.** $\lambda_k^{(-)} < \lambda_k(S) < \lambda_k^{(+)}$.
2. **Вычисление последовательностей Штурма.** Вычислить лево- и правостороннюю последовательности Штурма ${\mathcal{P}_j^{(+)}}^{[c]}$, ${\mathcal{P}_j^{(-)}}^{[c]}$ в граничных точках интервала $(\lambda_k^{(-)}, \lambda_k^{(+)})$.
3. **"Склейка".**

$$ {\varphi_j^{(+)}}^{[c]} = p_j^{(+)}\pi + \arctan {\mathcal{P}_j^{(+)}}^{[c]}, \qquad {\varphi_j^{(-)}}^{[c]} = p_j^{(-)}\pi + \arctan {\mathcal{P}_j^{(-)}}^{[c]}. $$

Определить максимальное целое число J такое, что

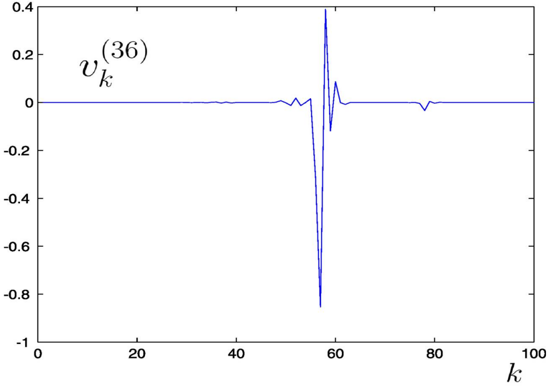
$$ {\varphi_{J-1}^{(+)}}^{[c]} \le {\varphi_{J-1}^{(-)}}^{[c]}. $$

Составить последовательность

$$ {\mathcal{P}_1^{(+)}}^{[c]}, \ {\mathcal{P}_2^{(+)}}^{[c]}, \ \ldots, \ {\mathcal{P}_{J-1}^{(+)}}^{[c]}, \ {\mathcal{P}_J^{(-)}}^{[c]}, \ {\mathcal{P}_{J+1}^{(-)}}^{[c]}, \ \ldots, \ {\mathcal{P}_{n-1}^{(-)}}^{[c]}. $$

Компоненты собственного вектора

$$\mathrm{v_{j+1}} = -\mathrm{sign}(\mathrm{b_{j+1}})\frac{\mathrm{v_j}}{\mathcal{P}_\mathrm{j}} \qquad (1 \leq \mathrm{j} \leq \mathrm{n})$$



Пример. Собственный вектор дискретного оператора Лапласа

Компоненты собственного вектора, соответствующего λ_5.

j	$v_j^{[c]}(A)$	j	$v_j^{[c]}(A)$
1	$1,7091997945912593\,10^{-1}$	19	$-1,2349295664634784\,10^{-1}$
2	$-1,9202699028731429\,10^{-1}$	20	$-3,8033519307486115\,10^{-2}$
3	$1,2349356976711463\,10^{-1}$	21	$3,0798716084600758\,10^{-1}$
4	$-1,2349356981976460\,10^{-1}$	22	$-3,0798716088340206\,10^{-1}$
5	$1,9202699040955387\,10^{-1}$	23	$3,8033519384512847\,10^{-2}$
6	$-1,7091997956880764\,10^{-1}$	24	$1,2349295660565680\,10^{-1}$
7	$-1,9202671739947114\,10^{-1}$	25	$1,9202671752171177\,10^{-1}$
8	$1,3706718128375556\,10^{-1}$	26	$-1,3706718146731692\,10^{-1}$
9	$3,8033027655166314\,10^{-2}$	27	$-3,8033027540355840\,10^{-2}$
10	$-3,8033027580584529\,10^{-2}$	28	$3,8033027657611559\,10^{-2}$
11	$-1,3706718146731683\,10^{-1}$	29	$1,3706718123028869\,10^{-1}$
12	$1,9202671756040385\,10^{-1}$	30	$-1,9202671734317767\,10^{-1}$
13	$1,2349295659369749\,10^{-1}$	31	$-1,7091997956880761\,10^{-1}$
14	$3,8033519382068150\,10^{-2}$	32	$1,9202699044824670\,10^{-1}$
15	$-3,0798716088647560\,10^{-1}$	33	$-1,2349356988754751\,10^{-1}$
16	$3,0798716084600752\,10^{-1}$	34	$1,2349356977907323\,10^{-1}$
17	$-3,8033519267257176\,10^{-2}$	35	$-1,9202699023102013\,10^{-1}$
18	$-1,2349295671413084\,10^{-1}$	36	$1,7091997938644862\,10^{-1}$

Невязка уравнения $Av = \lambda v$ порядка 10^{-10}.

Пример. Алгоритм Ланцоша

$$A = A^*$$

$$\text{Шаг 1.}\ \begin{array}{l} u \in \mathbb{R} \\ h^{(1)} = u/\|u\|, \\ d_1 = (Ah^{(1)}, h^{(1)}), \\ v^{(2)} = Ah^{(1)} - d_1 h^{(1)}, \\ b_2 = \|v^{(2)}\|, \\ h^{(2)} = v^{(2)}/b_2, \text{ если } b_2 \neq 0. \end{array}$$

$$\text{Шаг i.}\ \begin{array}{l} d_i = (Ah^{(i)}, h^{(i)}), \\ v^{(i+1)} = Ah^{(i)} - d_i h^{(i)} - b_i h^{(i-1)}, \\ b_{i+1} = \|v^{(i+1)}\|, \\ h^{(i+1)} = v^{(i+1)}/b_{i+1}, \text{ если } b_{i+1} \neq 0. \end{array}$$

Алгоритм Ланцоша, результаты расчетов

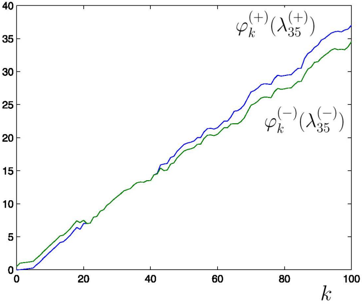
j	d_j	b_j	j	d_j	b_j
1	-23.552		51	-186.637	37.960
2	-66.775	11.251	52	-182.940	38.058
3	-117.027	41.155	53	-177.415	43.780
4	-125.815	45.162	54	-88.185	80.587
5	-125.404	70.378	55	-189.554	64.125
6	-231.417	77.149	56	-357.927	2.575
7	-184.780	84.609	57	-238.840	43.220
8	-241.779	89.594	58	-144.679	36.304
9	-233.926	70.514	59	-74.052	49.928
10	-236.845	70.344	60	-235.196	3.200
11	-203.267	80.781	61	-255.585	8.921
12	-214.559	87.826	62	-242.241	95.860
13	-229.170	56.088	63	-73.831	1.527
14	-168.062	62.439	64	-184.103	0.559
15	-234.675	44.736	65	-219.983	114.766
16	-224.583	53.063	66	-39.319	0.145
17	-245.480	55.270	67	-204.400	51.433
18	-251.095	24.465	68	-181.363	91.385
19	-160.612	8.983	69	-293.575	21.643
20	-228.718	23.391	70	-363.328	9.826
21	-19.848	$6.540\ 10^{-7}$	71	-210.582	35.702
22	-48.915	3.438	72	-231.190	17.674
23	-368.936	29.466	73	-99.648	49.210
24	-86.202	15.258	74	-181.413	70.516
25	-330.068	40.360	75	-162.721	33.056

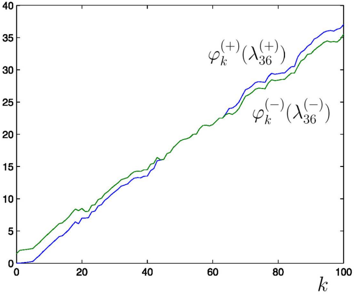
j	d_j	b_j	j	d_j	b_j
26	-102.753	42.134	76	-149.955	22.459
27	-281.951	47.467	77	-343.136	12.252
28	-160.025	53.119	78	-239.608	12.477
29	-237.493	57.418	79	-158.245	10.825
30	-197.959	50.263	80	-215.123	3.412
31	-224.476	32.581	81	-93.802	53.285
32	-227.040	55.214	82	-43.036	2.768
33	-196.498	60.676	83	-218.511	61.454
34	-210.601	22.953	84	-226.331	88.378
35	-240.639	24.752	85	-88.226	15.277
36	-189.674	19.577	86	-372.476	5.618
37	-208.568	41.002	87	-286.518	0.325
38	-190.688	4.649	88	-133.341	54.0988
39	-201.533	40.467	89	-264.016	26.465
40	-19.531	4.567	90	-60.881	54.409
41	-351.889	3.359	91	-310.665	3.359
42	-67.303	62.936	92	-231.031	62.936
43	-339.143	0.171	93	-234.697	4.240
44	-80.880	40.666	94	-202.333	24.641
45	-95.807	3.169	95	-177.568	56.826
46	-307.416	48.843	96	-50.854	7.837
47	-143.836	2.595	97	-137.653	60.527
48	-248.321	64.396	98	-178.222	3.024
49	-231.792	4.851	99	-135.094	78.951
50	-248.922	56.576	100	-254.870	14.074

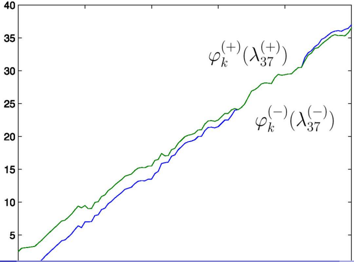
Собственные значения

j	$\widetilde{\lambda}_j(S)$	j	$\widetilde{\lambda}_j(S)$	j	$\widetilde{\lambda}_j(S)$	j	$\widetilde{\lambda}_j(S)$
1	-372.589	26	-278.909	51	-195.999	76	-86.044
2	-372.589	27	-278.909	52	-195.999	77	-85.897
3	-372.589	28	-262.487	53	-168.818	78	-85.897
4	-372.589	29	-262.487	54	-168.807	79	-85.897
5	-372.589	30	-262.487	55	-168.807	80	-85.897
6	-372.589	31	-262.487	56	-168.807	81	-74.105
7	-345.396	32	-262.487	57	-168.796	82	-73.892
8	-345.396	33	-259.098	58	-156.712	83	-73.795
9	-345.396	34	-239.614	59	-156.705	84	-73.795
10	-345.396	35	-239.614	60	-156.705	85	-73.795
11	-345.396	36	-239.614	61	-156.705	86	-73.795
12	-345.396	37	-239.614	62	-152.386	87	-49.329
13	-318.204	38	-235.294	63	-152.385	88	-46.603
14	-318.204	39	-235.294	64	-152.385	89	-46.603
15	-318.204	40	-235.294	65	-152.385	90	-46.603
16	-318.204	41	-235.294	66	-129.712	91	-46.603
17	-318.204	42	-235.040	67	-129.512	92	-46.603
18	-306.102	43	-223.193	68	-129.512	93	-23.552
19	-306.102	44	-223.192	69	-129.512	94	-19.410
20	-306.102	45	-223.192	70	-129.512	95	-19.410
21	-306.102	46	-223.192	71	-113.106	96	-19.410
22	-306.102	47	-223.192	72	-113.090	97	-19.410
23	-278.909	48	-196.012	73	-113.090	98	-19.410
24	-278.909	49	-196.000	74	-113.090	99	-19.410
25	-278.909	50	-195.999	75	-113.090	100	-16.192

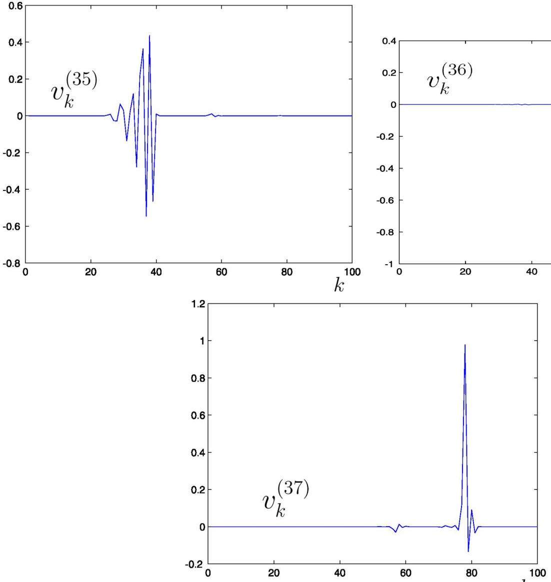
Двусторонние последовательности







Собственные векторы



Собственные векторы (логарифмы)