Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. С. Чхартишвили, Итерационное решение векового уравнения, *Матем. заметки*, 2005, том 77, выпуск 2, 303–310

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm2482>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.198.64.247

26 апреля 2023 г., 14:40:21

УДК 518.5+518.12+539.2

ИТЕРАЦИОННОЕ РЕШЕНИЕ ВЕКОВОГО УРАВНЕНИЯ

Л. С. Чхртишвили

Вековое уравнение с вещественной симметричной положительно определенной матрицей размера $n \times n$ преобразовано к системе n^2 квадратных уравнений, для которой возможно построение сходящейся процедуры итерационного решения. Приводится пример численной реализации метода для задачи определения электронного энергетического спектра.

Библиография: 7 названий.

1. Введение. Задача определения собственных значений некоторой матрицы $H = \|h_{ij}\|$ размера $n \times n$, $i, j = 1, \dots, n$, равносильна нахождению n корней ε_i , $i = 1, \dots, n$, векового уравнения

$$\det(H - E\Delta) = 0, \quad (1)$$

где $\Delta = \|\delta_{ij}\|$ обозначает единичную матрицу, а E является неизвестной величиной. Первоначально данное детерминантное уравнение было введено при исследовании вековых возмущений движения планет [1], но со временем его название приобрело “магический” смысл: на протяжении последующих полутора столетий было обнаружено, что целый ряд основных проблем разных фундаментальных и прикладных наук сводятся именно к решению векового уравнения.

Можно было бы рассматривать эквивалентное алгебраическое уравнение порядка n . Но подобный подход, нарушающий принцип непосредственного приложения, обычно сопряжен с трудоемким предвычислением коэффициентов алгебраического уравнения, после чего может возникнуть и другая проблема, связанная с чувствительностью его корней к погрешностям определения коэффициентов. Применение итерационных методов удается лишь для нахождения отдельных корней векового уравнения: наибольшего (наименьшего) по абсолютному значению или же какого-нибудь изолированного, для которого известно хорошее начальное приближение. Что же касается задачи одновременно вычисления всех собственных значений больших матриц, то она на практике решается с помощью построения преобразования подобия, придающего матрице специальный вид, из которого непосредственно следуют искомые величины. Методы преобразования подобия также являются итерационными в том смысле, что приведение матрицы осуществляется не иначе как через бесконечную последовательность более простых преобразований. Однако не существует единая итерационная функция, пригодная для генерирования приближения произвольного порядка. Например, в классическом методе Якоби, посредством плоских вращений преобразующем вещественную симметричную

матрицу в диагональную матрицу ее собственных значений, для каждой промежуточной матрицы определяется наибольший по абсолютному значению недиагональный элемент, после чего осуществляется то вращение, которое приведет к его аннулированию.

В настоящей работе вековое уравнение с вещественной симметричной положительно определенной матрицей размера $n \times n$ преобразовано к системе n^2 квадратных уравнений и показана возможность построения многомерной линейной итерационной функции, позволяющей единообразное нахождение всех последовательных приближений, которые сходятся к корням векового уравнения.

2. Представление векового уравнения системой квадратных уравнений.

Если H является вещественной симметричной положительно определенной матрицей, то по теореме Холецкого [2] существует вещественная невырожденная нижняя треугольная матрица $L = \|l_{ij}\|$ такая, что

$$H = LL^T, \quad (2)$$

где L^T обозначает матрицу, транспонированную к L . При этом возможно указать алгоритм последовательного и однозначного (при фиксировании положительности диагональных элементов) вычисления всех отличных от нуля элементов матрицы L :

$$\begin{aligned} l_{ii} &= \sqrt{h_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}, \quad i = 1, \dots, n, \\ l_{ij} &= \frac{h_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}}, \quad j = 1, \dots, i-1. \end{aligned} \quad (3)$$

С другой стороны, поскольку H является вещественной и симметричной, существует ортогональное преобразование, осуществляемое матрицей $O = \|o_{ij}\|$,

$$O^T O = \Delta, \quad (4)$$

такое, что

$$OHO^T = D, \quad (5)$$

где $D = \|d_{ij}\|$ – диагональная матрица ее собственных значений: $d_{ij} = \varepsilon_i \delta_{ij}$.

Умножим равенство (4) слева на L^T , а справа – на L и введем матрицу $V = \|v_{ij}\|$ соотношением

$$V = OL. \quad (6)$$

В результате получим уравнение

$$V^T V = B, \quad (7)$$

в правой части которого стоит вещественная симметричная положительно определенная матрица $B = \|b_{ij}\|$,

$$B = L^T L. \quad (8)$$

Из формул (3) и (8) видно, что элементы этой матрицы в явном виде (в радикалах) выражаются через элементы исходной матрицы H . В равенстве (5) матрицу H заменим ее представлением Холецкого (2) и снова введем матрицу V . Это даст другое уравнение,

$$VV^T = D. \quad (9)$$

Матричное уравнение (7) равносильно n^2 уравнениям относительно элементов матрицы V :

$$\sum_{k=1}^n v_{ki} v_{kj} = b_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad (10)$$

тогда как матричное уравнение (9) – только $n(n-1)$ уравнениям:

$$\sum_{k=1}^n v_{ik} v_{jk} = 0 \quad i, j = 1, \dots, n \quad i \neq j, \quad (11)$$

поскольку остальные n равенств, соответствующие диагональным элементам ($i = j$), в своих правых частях содержат подлежащие определению собственные значения ε_i . Если составить суммы и разности пар уравнений из систем (10) и (11) с одинаковыми индексами, они превратятся в систему $n(2n-1)$ уравнений,

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n (v_{ki} v_{kj} + v_{ik} v_{jk}) &= b_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad i \neq j, \\ \sum_{k=1}^n v_{ki}^2 &= b_{ii}, \quad i = 1, \dots, n, \\ \sum_{k=1}^n (v_{ki} v_{kj} - v_{ik} v_{jk}) &= b_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad i \neq j, \end{aligned} \quad (12)$$

из которых, однако, независимыми являются только n^2 , так как $b_{ij} = b_{ji}$ и, следовательно, при взаимной перестановке индексов i и j эти уравнения не изменяются. Данное обстоятельство позволяет отбросить уравнения с суммами в левой части, если $i < j$, и уравнения с разностями, если $i > j$, и таким путем придать единообразный вид всем независимым уравнениям,

$$f_{(ij)}(V) = \sum_{k=1}^n (v_{ki} v_{kj} + \operatorname{sgn}(i-j) v_{ik} v_{jk}) - b_{ij} = 0, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (13)$$

Полученная система состоит из n^2 квадратных уравнений относительно n^2 элементов матрицы V . Через ее решения корни векового уравнения определяются как

$$\varepsilon_j = \sum_{k=1}^n v_{ik}^2. \quad (14)$$

3. Итерационное решение эквивалентной системы уравнений. Приближение порядка m к решению эквивалентной вековому уравнению (1) системы уравнений (13), $V^{[m]} = \|v_{ij}^{[m]}\|$, в рамках обобщенного на многомерный случай метода Ньютона [3] определяется через приближение порядка $m-1$ путем решения системы n^2 линейных уравнений

$$f_{(ij)}(V^{[m-1]}) + \sum_{(pq)=1}^{n^2} j_{(ij)(pq)}(V^{[m-1]})(v_{pq}^{[m]} - v_{pq}^{[m-1]}) = 0, \quad (ij) = 1, \dots, n^2, \quad (15)$$

Следовательно, якобиан в начальной точке равен

$$\det(J(V^{[0]})) = \det(J(L)) \approx 2^{n(n+1)/2} \prod_{i=1}^n h_{ii}^{n-i+1/2} \quad (17)$$

и отличен от нуля, поскольку H положительно определена. Данный результат означает существование в этой же точке обратной матрицы Якоби $J^{-1}(V) = \|j_{(ij)(pq)}^{-1}(V)\|$, которая для рассматриваемого случая тоже аппроксимируется разреженной матрицей. На диагонали будут стоять $1/(2\sqrt{h_{ii}})$ по $2(n-i)+1$ раза, $i = 1, \dots, n$. При этом для каждого значения индекса i имеется по одному из случаев, когда в пересекающихся на диагональном элементе строке и столбце все недиагональные элементы являются нулями. В остальных же строках и столбцах, пересекающихся на диагональном элементе, присутствуют по одному ненулевому недиагональному элементу: $1/(2\sqrt{h_{ii}})$ и $-1/(2\sqrt{h_{ii}})$ соответственно. Теперь положительные элементы расположены в наддиагональной, а отрицательные – в поддиагональной частях матрицы. Например, когда $n = 3$, обратная матрица Якоби в начальной точке приблизительно выразится в следующем виде:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{h_{11}}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{11}}} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{11}}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{11}}} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{11}}} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2\sqrt{h_{11}}} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{11}}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{22}}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{22}}} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{22}}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2\sqrt{h_{11}}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{11}}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2\sqrt{h_{22}}} & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{22}}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{h_{33}}} \end{pmatrix}.$$

При оценке матричных норм будем считать, что условие $h_{n-1n-1} \gg h_{nn}$ для предпоследнего и последнего диагональных элементов матрицы H подразумевает по меньшей мере выполнение неравенства $\sqrt{h_{n-1n-1}} > 2\sqrt{h_{nn}}$, а доминирование диагональных элементов над суммами абсолютных значений $n-1$ недиагональных элементов в строках означает по меньшей мере n -кратное превосходство последнего диагонального элемента над абсолютным значением любого недиагонального элемента матрицы. Максимальная сумма абсолютных значений элементов обратной матрицы Якоби в начальной точке получится в ее последней строке:

$$\max_{(ij)} \left(\sum_{(pq)}^{n^2} |j_{(ij)(pq)}^{-1}(V^{[0]})| \right) \approx \max \left(\frac{1}{\sqrt{h_{n-1n-1}}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{h_{nn}}} \right) = \frac{1}{2\sqrt{h_{nn}}} \equiv B, \quad (18)$$

а максимум аналогичных сумм, в которых, однако, слагаемые взяты с весовыми множителями в виде функций (16), равен

$$\max_{(ij)} \left(\sum_{(pq)}^{n^2} |j_{(ij)(pq)}^{-1}(V^{[0]}) f_{(pq)}(V^{[0]})| \right) \approx \frac{|h_{kl}|}{\sqrt{h_{kk}}} \equiv \eta, \quad (19)$$

где k и l – некоторые индексы, удовлетворяющие неравенствам $k < l \leq n$. Далее заметим, что когда $i \neq j$, стоящие в левых частях уравнений (13) функции $f_{(ij)}(V)$ наряду с постоянными слагаемыми b_{ij} содержат квадратичные формы неизвестных с коэффициентами равными 0 или 1. При этом каждое из $2n$ ненулевых слагаемых является произведением различных неизвестных. Когда же $i = j$, в аналогичных квадратичных формах имеются по n ненулевых слагаемых и все они представляют собой квадраты неизвестных. Следовательно, сумма абсолютных значений всех частных производных второго порядка по неизвестным в произвольной точке для любой из функций $f_{(ij)}(V)$ одна и та же постоянная величина:

$$\sum_{(pq)=1}^{n^2} \sum_{(rs)=1}^{n^2} \left| \frac{\partial^2 f_{(ij)}(V)}{\partial v_{pq} \partial v_{rs}} \right| = 2n \equiv K. \quad (20)$$

Из определений (18)–(20) видно, что B , η и K являются положительными числами и удовлетворяют условию

$$2B\eta K \approx \frac{2n|h_{kl}|}{\sqrt{h_{kk}h_{nn}}} < \frac{n|h_{kl}|}{h_{nn}} < 1 \quad (21)$$

теоремы Канторовича [4] о сходимости обобщенного метода Ньютона.

Ключевым фактором, благоприятствующим сходимости, является квадратность эквивалентной системы уравнений (13), ведущая к ограниченности суммы абсолютных значений всех частных производных второго порядка их левых частей (20). Что же касается условий, наложенных на отношения абсолютных значений недиагональных элементов с диагональными и последних друг с другом при выборе начального приближения в форме матрицы Холецкого, которые помогли показать принципиальную возможность сходимости итерационного процесса для векового уравнения произвольного порядка, то они не являются необходимыми в настолько жесткой форме для конкретных уравнений.

Разумеется, систему (13) можно решать и посредством других итерационных методов. Так, например, обобщенный метод секущих [3] также приведет к системе линейных уравнений: итерационные функции будут выражаться формулами Крамера. В рамках такого подхода, требующего два начальных приближения, охватывающих корень, в этом качестве можно использовать матрицы $V^{[0]} = -L$ и $V^{[1]} = L$, которые соответствуют границам интервалов допустимых значений элементов ортогональной матрицы O .

4. Пример итерационного решения векового уравнения: квазиклассические энергии внутренних электронов молекулы дибора. Одним из важнейших приложений методов решения векового уравнения является расчет энергетического спектра электронных состояний в полиатомных системах – молекулах и кристал-

лах. Соответствующая математическая проблема, изначально формулируемая как обобщенная задача на собственные значения с эрмитовыми матрицами Гамильтона и интегралов перекрытия, приводима к стандартной задаче (1) для вещественной симметричной положительно определенной матрицы. С точки зрения возможности итерационного решения эквивалентной системы уравнений (13) примечательно, что в подобных матрицах часть недиагональных элементов точно равны нулю из-за взаимной ортогональности волновых функций разных электронных состояний, принадлежащих одним и тем же атомам, а другая часть мала благодаря слабости перекрытия между волновыми функциями электронов внутренних оболочек различных атомов. В специальном случае начального квазиклассического приближения нулями заменяются и те малые матричные элементы, которые обусловлены перекрытием экспоненциально затухающих “хвостов” электронных состояний вне классически доступных для них областей. Дело в том, что в этом приближении матричные элементы гамильтониана выражаются линейными комбинациями объемов областей пересечения трех сфер [5], радиусы которых определяются радиусами классических точек поворота пары перекрывающихся связанных электронных состояний, а также состояний в создающем потенциал атоме [6].

В качестве примера итерационного решения векового уравнения путем перехода к эквивалентной системе квадратных уравнений нами для молекулы дибора $\mathbf{B}_2$ была проанализирована задача определения абсолютных значений энергий (т.е. потенциалов ионизации) электронных состояний, генерированных из состояний внутренних оболочек $1s$ и $2s$ двух составляющих атомов бора. Соответствующее вековое уравнение должно обладать четырьмя положительными корнями $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ и ε_4 . При этом, поскольку в изолированных атомах бора энергетические уровни $1s$ состояний располагаются существенно ниже $2s$ состояний, следует ожидать, что 2 из них будут заметно превосходить остальные 2 корня. Приведенная матрица Гамильтона молекулы $\mathbf{B}_2$ в начальном квазиклассическом приближении такова (квазиклассические параметры атомов, необходимые при расчетах боросодержащих систем даны, например, в [7]):

$$H(\mathbf{B}_2) = \begin{pmatrix} 0.3672 & 0 & 0.0974 & 0.3979 \\ 0 & 9.1203 & 0 & 0 \\ 0.0974 & 0 & 0.2418 & -0.2158 \\ 0.3979 & 0 & -0.2158 & 9.0972 \end{pmatrix}.$$

Ей соответствуют матрицы

$$L(\mathbf{B}_2) = \begin{pmatrix} 0.6061 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3.0201 & 0 & 0 \\ 0.1607 & 0 & 0.4647 & 0 \\ 0.6567 & 0 & -0.6915 & 2.8614 \end{pmatrix},$$

$$B(\mathbf{B}_2) = \begin{pmatrix} 0.8243 & 0 & -0.3794 & 1.8791 \\ 0 & 9.1203 & 0 & 0 \\ -0.3794 & 0 & 0.6941 & -1.9786 \\ 1.8791 & 0 & -1.9786 & 8.1879 \end{pmatrix}.$$

Здесь численные значения элементов приводятся в атомных единицах при сохранении четырех десятичных знаков, что достаточно для достижения типичной точности задания межатомных расстояний, которые служат исходными данными, лимитирующими

точность расчетов электронного энергетического спектра вещества. Рассматриваемый пример интересен и тем, что дополнительное аннулирование ряда матричных элементов благодаря начальному квазиклассическому приближению приводит к взаимной кратности больших собственных значений матрицы $H(\mathbf{B}_2)$.

Сильные различия в значениях диагональных элементов этой матрицы имеют место, если сравнивать две большие с двумя малыми. Доминирующими являются только те же два больших диагональных элемента. Но это оказывается достаточным для сходимости итерационного метода Ньютона при выборе начального приближения в форме матрицы $L(\mathbf{B}_2)$. Более того, он сразу дает значение одного из больших корней. Кратный ему корень совместно с двумя малыми с точностью до четвертого десятичного знака находятся на пятой итерации:

итерация	ε_1	ε_2	ε_3	ε_4
0	0.3672	9.1203	0.2418	9.0972
1	0.8233	9.1203	0.3895	9.1441
2	0.6175	9.1203	0.2043	9.1204
3	0.4276	9.1203	0.1904	9.1221
4	0.4149	9.1203	0.1743	9.1204
5	0.4138	9.1203	0.1720	9.1203
6	0.4138	9.1203	0.1720	9.1203

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Jacobi C. G. J. Über ein leichtes Verfahren, die in der Theorie der Säcularstörungen Vorkommenden Gleichungen numerisch aufzulösen // Crelles J. 1846. V. 30. P. 51–94.
- [2] Хорн Р., Джонсон Ч. Матричный анализ. М.: Мир, 1989.
- [3] Трауб Дж. Итерационные методы решения уравнений. М.: Мир, 1985.
- [4] Канторович Л. В. О методе Ньютона для функциональных уравнений // Докл. АН СССР. 1948. Т. 59. № 7. С. 1237–1240.
- [5] Чхартишвили Л. С. Объем области пересечения трех сфер // Матем. заметки. 2001. Т. 69. № 3. С. 466–476.
- [6] Chkhartishvili L., Lezhava D., Tsagareishvili O. Quasi-classical determination of electronic energies and vibration frequencies in boron compounds // J. Solid State Chem. 2000. V. 154. № 1. P. 148–152.
- [7] Chkhartishvili L. Ground state parameters of wurtzite boron nitride: Quasi-classical estimations // Proceedings of the 1st International Boron Symposium / ed. K. Erarslan. Ankara: Dumlupinar University, 2002. P. 139–143.