

БИБЛИОТЕКА СВОРНИКА «МАТЕМАТИКА»

Mitteilungen aus dem Institut für angewandte Mathematik

AN DER EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEM HOCHSCHULE IN ZÜRICH  
HERAUSGEgeben von PROF. DR. E. STIEFEL

DER QUOTIENTEN-DIFFERENZEN-  
ALGORITHMUS

*von*

Heinz Rutishauser

*Professor an der Eidgenössischen Technischen  
Hochschule in Zürich*

Г. РУТИСХАУЗЕР

АЛГОРИТМ  
ЧАСТНЫХ И РАЗНОСТЕЙ

*Перевод с немецкого*  
В. М. КУРОЧКИНА

BIRKHAUSER VERLAG·BASEL/STUTTGART  
1957

ИЗДАТЕЛЬСТВО  
ИНОСТРАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ  
Москва—1960

## АННОТАЦИЯ

В настоящей брошюре изложен новый метод численного решения некоторых часто встречающихся на практике задач. Метод развивается на базе теории непрерывных дробей. Он позволяет значительно сократить объем вычислительной работы. Рассматривается применение этого метода к решению таких «классических» задач, как решение алгебраических уравнений, нахождение собственных значений и собственных векторов и др.

Книга представляет интерес для лиц, интересующихся новыми, численными методами, а также для студентов физико-математических факультетов университетов и педагогических институтов.

Редакция литературы по математическим наукам

## ПРЕДИСЛОВИЕ ПЕРЕВОДЧИКА

В этой небольшой книге рассматриваются очень интересные вопросы, связанные с применением непрерывных дробей для численного решения некоторых часто встречающихся на практике задач, в том числе и таких «классических», как решение алгебраических уравнений (нахождение всех корней — действительных и комплексных), нахождение собственных значений и собственных векторов и др. Многие из применяемых сейчас методов для решения этих задач связаны либо с большим объемом вычислительной работы, либо с какими-нибудь ограничениями, суживающими область их применения. Методы, развиваемые автором на базе теории непрерывных дробей, представляются в этом отношении весьма заманчивыми. Некоторые из них неожиданно оказываются просто красивыми. Следует, однако, заметить, что вся эта теория создана сравнительно недавно и, по-видимому, не получила еще достаточно широкой проверки при практических расчетах, особенно при полностью автоматизированных расчетах, выполняемых современными быстродействующими вычислительными машинами. Недостаточно использовались эти методы и у нас. Можно надеяться, что издание русского перевода этой книги будет способствовать более

широкому распространению и дальнейшему развитию предлагаемых автором численных методов.

Книга состоит, по существу, из трех отдельных журнальных статей, лишь незначительно переработанных автором. Это наложило известный отпечаток на характер изложения материала и может создать некоторые трудности при чтении. В частности, в тексте содержатся многочисленные ссылки на другие статьи, и часто терминология и обозначения из этих статей используются без достаточных разъяснений. Мы не сочли возможным делать в таких случаях примечания, так как их было бы слишком много.

## ВВЕДЕНИЕ

В связи с практическим применением ВО-алгоритма (алгоритм биортогонализации, предложенный Ланцошем, см. [4], [5]) проф. Е. Штифель обратил мое внимание на проблему получения старших собственных значений непосредственно по константам Шварца, без использования обходного пути с биортогонализацией. Это послужило автору поводом для разработки алгоритма, решающего указанную задачу.

Правда, уже Айткен [1] предложил метод, предназначавшийся им главным образом для решения алгебраических уравнений и также дающий возможность получать старшие собственные значения по константам Шварца. Далее, Ланцошу<sup>1)</sup> принадлежит алгоритм построения характеристического уравнения матрицы по константам Шварца. Адамар в своей диссертации [2] дал способ определения полюсов функции по ее разложению в степенной ряд. Как будет показано в § 1, он решил тем самым и упомянутую выше проблему о собственных значениях. Уже решенная проблема изучается здесь снова только потому, что предлагаемый алгоритм имеет также ряд других примене-

<sup>1)</sup> Речь идет не о ВО-алгоритме. См. главу VI работы [4] и стр. 173—179 работы [5].

ний, и в частности он указывает на весьма интересную связь с теорией непрерывных дробей<sup>1)</sup>.

Книга состоит из трех глав; в первых двух излагается теория и применение QD-алгоритма, глава III посвящена распространению QD-алгоритма на векторы. Наконец, в приложении рассматриваются некоторые связанные с этим вопросы и, в частности, LR-преобразования. Главы I, II и III были опубликованы отдельными статьями в журнале ZAMP<sup>2)</sup>, а главы I и II для этого издания были частично переработаны.

<sup>1)</sup> Я благодарен проф. Штифелю за указания на возможность упростить некоторые доказательства с помощью непрерывных дробей.

<sup>2)</sup> Глава I—ZAMP 5 (1954), 233—251; глава II—ZAMP 5 (1954), 496—508; глава III—ZAMP 6 (1955), 387—401.

## Глава I

### ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

#### § 1. Постановка задачи

Пусть  $A$ —квадратная матрица порядка  $n$ ,  $A^*$ —транспонированная матрица, а  $x_0$  и  $y_0$ —два вектора, находящихся в «общем положении» по отношению к матрицам  $A$  и  $A^*$  соответственно; другими словами, отличны от нуля все компоненты вектора  $x_0$  (соответственно  $y_0$ ) в базисе, состоящем из собственных и присоединенных векторов матрицы  $A$  (соответственно  $A^*$ ).

Образуем теперь из  $x_0$  и  $y_0$  бесконечное количество векторов  $x_v = A^v x_0$  и  $y_v = (A^*)^v y_0$ , а также их скалярные произведения  $s_{\mu+v} = (x_\mu, y_v)$ , которые зависят, очевидно, только от суммы индексов  $\mu$  и  $v$  и будут в дальнейшем называться константами Шварца матрицы  $A$  по отношению к начальным векторам  $x_0$  и  $y_0$ .

Функция

$$f(z) = \sum_0^\infty \frac{s_x}{z^{x+1}}, \quad (1)$$

образованная с помощью этих констант, рациональна, причем ее полюсы совпадают с собственными значениями матрицы  $A$ , так как

$$f(z) = (Bx_0, y_0), \text{ где } B = (zE - A)^{-1}.$$

Таким образом, стоящая перед нами задача, а именно выявление собственных значений матрицы  $A$  с помощью констант Шварца, сводится к определению полюсов рациональной функции

$$f(z) = \frac{s_0}{z} + \frac{s_1}{z^2} + \dots$$

В случае когда  $A$ —бесконечная матрица или интегральный оператор, функция  $f(z)$  не обязательно должна быть

рациональной, однако ее полюсы по-прежнему оказываются собственными значениями для  $A$ . Можно доказать, что в определенных случаях  $f(z)$  является мероморфной функцией, в частности, если константы Шварца получаются из самосопряженной и положительно определенной задачи на собственные значения, для которой справедлива теорема о разложении.

Исходя из изложенного, целесообразно изучать не задачу нахождения собственных значений, а вслед за Адамаром [2] более общую задачу нахождения полюсов функции  $f(z)$ , определяемой рядом (1) с произвольными комплексными числами  $s_n$ . Кроме того, в некоторых случаях будет отыскиваться также разложение  $f(z)$  на простейшие дроби (если, конечно, оно существует).

## § 2. Алгоритм частных и разностей (QD-алгоритм)

Для случая когда функция

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s_n}{z^{n+1}} \quad (1)$$

вне некоторого круга  $|z|=R$  имеет в точности один простой полюс  $\lambda_1$ , уже Д. Бернуlli дал формулу

$$\lambda_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_{n+1}}{s_n}. \quad (2a)$$

Для определения последующих полюсов можно применить формулы (21), приведенные у Айткена [1]; например, для нахождения полюса  $\lambda_2$  при дополнительном предположении  $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3|$  может служить соотношение

$$\lambda_2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\begin{vmatrix} s_{n+1} & s_{n+2} \\ s_{n+2} & s_{n+3} \end{vmatrix} s_{n+1}^{-1}}{\begin{vmatrix} s_n & s_{n+1} \\ s_{n+1} & s_{n+2} \end{vmatrix} s_n^{-1}}. \quad (2b)$$

Аналогичные формулы могут быть выписаны для нахождения и последующих полюсов. Однако, использовав тождество

$$\begin{vmatrix} s_n & s_{n+1} \\ s_{n+1} & s_{n+2} \end{vmatrix} s_n^{-1} = s_{n+1} \left( \frac{s_{n+2}}{s_{n+1}} - \frac{s_{n+1}}{s_n} \right),$$

можно получить  $\lambda_2$  из констант Шварца  $s_v = s_1^{(v)} \cdot 1$  также с помощью следующего процесса:

Образуем частные  $q_1^{(v)} = s_1^{(v+1)} / s_1^{(v)}$ , затем из  $q_1^{(v)}$  образуем разности  $d_1^{(v)} = q_1^{(v+1)} - q_1^{(v)}$  и, наконец, произведения

$$s_2^{(v)} = s_1^{(v+1)} d_1^{(v)} \left( = \frac{1}{s_v} \begin{vmatrix} s_v & s_{v+1} \\ s_{v+1} & s_{v+2} \end{vmatrix} \right).$$

Тогда, согласно (2b),  $\lambda_2$  будет равно пределу частных  $q_2^{(v)} = s_2^{(v+1)} / s_2^{(v)}$  при  $v \rightarrow \infty$  точно так же, как  $\lambda_1$  равно пределу  $q_1^{(v)}$  [согласно (2a)].

При практических расчетах все числа  $s_1^{(v)}, q_1^{(v)}, \dots$  пишут столбцами друг за другом: колонка констант Шварца  $s_1^{(v)}$ , затем столбец частных  $q_1^{(v)}$ , столбец разностей  $d_1^{(v)}$  и т. д. (См. пример на стр. 12.)

Можно предположить, что при соответствующем продолжении этого процесса в качестве предельных значений последовательностей частных  $q_3^{(v)}, q_4^{(v)}, \dots$  мы получим также и следующие полюсы  $\lambda_3, \lambda_4, \dots$  (предполагается, что  $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > |\lambda_4| > \dots$ ).

В действительности дело так и обстоит; нужно только последующие столбцы разностей  $d_\sigma^{(v)}$  ( $\sigma = 2, 3, \dots$ ) перед умножением на  $s_\sigma^{(v+1)}$  несколько изменить; в результате получается следующее правило для применения QD-алгоритма к заданному ряду коэффициентов (констант Шварца)  $s_v = s_1^{(v)}$ .

Отправляясь от  $s_1^{(v)}$ , считаем последовательно ( $\sigma = 1, 2, 3, \dots$ )

$$\left. \begin{array}{l} q_\sigma^{(v)} = s_\sigma^{(v+1)} / s_\sigma^{(v)} \quad \text{последовательность частных}, \\ d_\sigma^{(v)} = q_\sigma^{(v+1)} - q_\sigma^{(v)} \quad \text{последовательность разностей}, \\ e_\sigma^{(v)} = d_\sigma^{(v)} + e_{\sigma-1}^{(v+1)} \quad \text{модифицированные разности}^2), \\ s_{\sigma+1}^{(v)} = s_\sigma^{(v+1)} e_\sigma^{(v)} \quad \text{последовательность новых величин } s. \end{array} \right\} \quad (3)$$

<sup>1)</sup> В дальнейшем мы будем также обозначать константы Шварца  $s_v$  через  $s_1^{(v)}$ .

<sup>2)</sup> Для  $\sigma = 1$  величины  $e_1^{(v)}$  и  $d_1^{(v)}$  совпадают, т. е.  $e_0^{(v)} = 0$ .

Получаемые таким образом величины можно расположить по следующей схеме (QD-схема):

ПРИМЕР QD-АЛГОРИТМА. В качестве  $s_1^{(v)}$  возьмем так называемые числа Фибоначчи; тогда

$$f(z) = \frac{z}{z^2 - z - 1},$$

$s_1^{(v)}$	$q_1^{(v)}$	$d_1^{(v)} = e_1^{(v)}$	$s_2^{(v)}$	$q_2^{(v)}$	$d_2^{(v)}$	$e_2^{(v)}$	$s_3^{(v)}$
1	1						
1	2	1	1				
2	1,5	-0,5	1				
3	1,666667	0,166667	-1	-1			
5	1,666667	-0,066667	0,5	-0,5	+0,5	0	0
8	1,6	-0,333333	-0,666667	-0,166667	0	0	0
13	1,625	+0,025	-0,025	+0,066667	0	0	0
13	1,625	+0,2	-0,6	-0,025	0	0	0
13	1,615384	-0,009615	-0,625	-0,125			
21	1,618034						
21	1,618034						

Уже на этом простом примере можно подметить один факт, который в дальнейшем будет доказан в общем виде:

Если  $f(z)$  — рациональная функция, знаменатель которой имеет степень  $n$ , то QD-схема обрывается после

образования столбца  $n$ -х модифицированных разностей аналогично тому, как обрывается на  $n$ -м шаге схема образования обычных разностей для многочлена.

Указанное свойство позволяет в таких случаях заполнять QD-схему сверху вниз, если только нам известны все величины, стоящие в верхнем (косом) ряду:

$$s_0, q_1^{(0)}, e_1^{(0)}, q_2^{(0)}, \dots, e_{n-1}^{(0)}, q_n^{(0)}$$

Этот процесс, аналогичный хорошо известным схемам с обычными разностями, особенно важен для приложений.

### § 3. Правила ромба

Если не требуется получить величины  $s_\sigma^{(v)}$  ( $\sigma > 1$ ), то можно руководствоваться при вычислениях следующим, более простым правилом (считаем, что  $e_0^{(v)} = 0$  и  $q_1^{(v)} = s_{v+1}/s_v$ ):

$$\left. \begin{aligned} e_{\sigma}^{(v)} &= e_{\sigma-1}^{(v+1)} + q_{\sigma}^{(v+1)} - q_{\sigma}^{(v)}, \\ q_{\sigma+1}^{(v)} &= q_{\sigma}^{(v+1)} \cdot \frac{e_{\sigma}^{(v+1)}}{e_{\sigma}^{(v)}}, \end{aligned} \right\} \sigma = 1, 2, \dots, \quad (4)$$

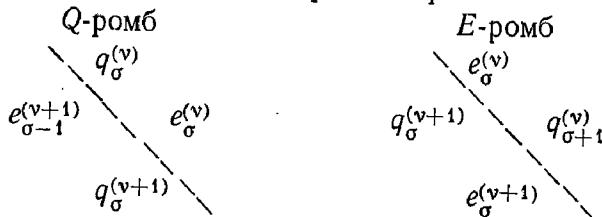
и получить упрощенную форму QD-схемы

$S_1^{(0)}$					
	$q_1^{(0)}$		$e_1^{(0)}$		$q_2^{(0)}$
$S_1^{(1)}$		$q_1^{(1)}$		$e_1^{(1)}$	$e_2^{(0)}$
			$e_1^{(2)}$	$q_2^{(1)}$	$q_3^{(0)}$
$S_1^{(2)}$		$q_1^{(2)}$		$e_2^{(1)}$	
			$e_1^{(3)}$	$q_2^{(2)}$	$q_3^{(1)}$
$S_1^{(3)}$	.	.	$e_1^{(2)}$	.	$e_2^{(1)}$
.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.

Вышеприведенные формулы (4), по которым строится упрощенная QD-схема, могут быть сформулированы по предложению Штифеля<sup>1)</sup> в виде так называемых *правил ромба*.

<sup>1)</sup> См. Штифель ([13], стр. 42).

Каждая из формул (4) связывает четыре элемента, расположенных в схеме в вершинах ромбов



Для этих элементов выполняются следующие соотношения:

*Q-правило.* В *Q*-ромбе сумма элементов, стоящих выше пунктирной линии, равна сумме элементов, расположенных ниже этой линии.

*E-правило.* В *E*-ромбе произведение элементов, расположенных выше пунктирной линии, равно произведению элементов, расположенных ниже этой линии.

#### § 4. Многочлены $p_{\sigma}^{(v)}(z)$

До некоторой степени предшественником ВО-алгоритма был указанный Ланцошем и упоминавшийся выше способ получения характеристического многочлена матрицы по ее константам Шварца. В ходе выполнения этого процесса, который, впрочем, весьма близок к QD-алгоритму, строится цепочка многочленов  $p_0 \equiv 1, p_1(\lambda), p_2(\lambda), \dots$ , последний член которой  $p_m(\lambda)$  является минимальным многочленом матрицы  $A$ .

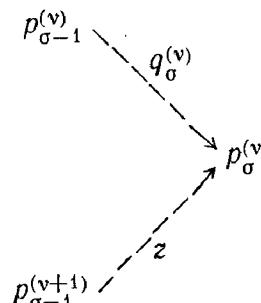
Запишем следующую схему (Р-схема):

$$\begin{array}{ccccccc} & p_0^{(0)} & & & & & \\ & & p_1^{(0)} & & & & \\ p_0^{(1)} & & p_0^{(0)} & p_2^{(0)} & & & \\ & p_1^{(1)} & & & p_3^{(0)} & & \\ p_{01}^{(2)} & & p_1^{(1)} & p_2^{(1)} & p_3^{(0)} & & \\ & p_1^{(2)} & & \cdot & p_3^{(1)} & & \\ & \cdot & & \cdot & \cdot & & \\ & \cdot & & \cdot & \cdot & & \end{array}$$

из многочленов  $p_{\sigma}^{(v)}(z)$  степени  $\sigma$ , которые образуются по формулам:

$$\left. \begin{aligned} p_0^{(v)} &\equiv 1 \text{ для всех } v, \\ p_{\sigma}^{(v)}(z) &= z p_{\sigma-1}^{(v+1)}(z) - q_{\sigma}^{(v)} p_{\sigma-1}^{(v)}(z); \\ v &= 0, 1, \dots; \quad \sigma = 1, 2, \dots \end{aligned} \right\}. \quad (5)$$

Формулы (5) можно изобразить схематически так, чтобы легко был виден закон, по которому образуется каждый элемент  $p_{\sigma}^{(v)}$  Р-схемы из элементов  $p_{\sigma-1}^{(v+1)}$  и  $p_{\sigma-1}^{(v)}$ , расположенных слева от него:



Мы хотим теперь доказать следующие соотношения для многочленов  $p_{\sigma}^{(v)}(z)$ :

$$p_{\sigma}^{(v+1)} - p_{\sigma}^{(v)} = -e_{\sigma}^{(v)} p_{\sigma-1}^{(v+1)} \quad \text{для } \sigma \geq 0, \quad (6)$$

$$\left. \begin{aligned} p_1^{(v)} - (z - q_1^{(v)}) p_0^{(v)} &= 0, \\ p_{\sigma+1}^{(v)} - (z - q_{\sigma+1}^{(v)} - e_{\sigma}^{(v)}) p_{\sigma}^{(v)} + e_{\sigma}^{(v)} q_{\sigma}^{(v)} p_{\sigma-1}^{(v)} &= 0 \quad \text{для } \sigma > 0. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

*Доказательство формулы (6).* Формула (6), очевидно, верна при  $\sigma = 0$  для всех  $v$ , так как  $p_0^{(v)} \equiv 1$  и  $e_0^{(v)} = 0$ . Докажем ее по индукции, предполагая, что она верна для  $\sigma - 1$ , т. е. что справедливо соотношение

$$p_{\sigma-1}^{(v+1)} - p_{\sigma-1}^{(v)} + e_{\sigma-1}^{(v)} p_{\sigma-2}^{(v+1)} = 0.$$

Введем обозначение

$$\delta = p_{\sigma}^{(v+1)} - p_{\sigma}^{(v)} + e_{\sigma}^{(v)} p_{\sigma-1}^{(v+1)}.$$

Величина  $\delta$  в силу формул (5) равна

$$z(p_{\sigma-1}^{(v+2)} - p_{\sigma-1}^{(v+1)}) - q_{\sigma}^{(v+1)} p_{\sigma-1}^{(v+1)} + q_{\sigma}^{(v)} p_{\sigma-1}^{(v)} + e_{\sigma}^{(v)} p_{\sigma-1}^{(v+1)}.$$

Используя равенство

$$q_{\sigma}^{(v+1)} - e_{\sigma}^{(v)} = q_{\sigma}^{(v)} - e_{\sigma-1}^{(v+1)}$$

[см. (4)], получаем

$$\delta = z(p_{\sigma-1}^{(v+2)} - p_{\sigma-1}^{(v+1)}) - q_{\sigma}^{(v)}(p_{\sigma-1}^{(v+1)} - p_{\sigma-1}^{(v)}) + e_{\sigma-1}^{(v+1)}p_{\sigma-1}^{(v+1)}$$

или, используя индуктивное предположение,

$$\delta = -ze_{\sigma-1}^{(v+1)}p_{\sigma-2}^{(v+2)} + q_{\sigma}^{(v)}e_{\sigma-1}^{(v)}p_{\sigma-2}^{(v+1)} + e_{\sigma-1}^{(v+1)}p_{\sigma-1}^{(v+1)}.$$

Применяя соотношение

$$q_{\sigma}^{(v)}e_{\sigma-1}^{(v)} = q_{\sigma-1}^{(v+1)}e_{\sigma-1}^{(v+1)}$$

[см. (4)], получаем, наконец,

$$\delta = e_{\sigma-1}^{(v+1)}(-zp_{\sigma-2}^{(v+2)} + q_{\sigma-1}^{(v+1)}p_{\sigma-2}^{(v+1)} + p_{\sigma-1}^{(v+1)})$$

и в силу равенства (5)  $\delta = 0$ , что и требовалось доказать.

Доказательство формул (7). Прибавляя к (7) умноженное на  $z$  равенство (6), получаем

$$\begin{aligned} p_{\sigma+1}^{(v)} - zp_{\sigma}^{(v+1)} - ze_{\sigma}^{(v)}p_{\sigma-1}^{(v+1)} + q_{\sigma+1}^{(v)}p_{\sigma}^{(v)} + e_{\sigma}^{(v)}p_{\sigma}^{(v)} + e_{\sigma}^{(v)}q_{\sigma}^{(v)}p_{\sigma-1}^{(v)} = \\ = (p_{\sigma+1}^{(v)} - zp_{\sigma}^{(v+1)} + q_{\sigma+1}^{(v)}p_{\sigma}^{(v)}) + e_{\sigma}^{(v)}(p_{\sigma}^{(v)} - zp_{\sigma-1}^{(v+1)} + q_{\sigma}^{(v)}p_{\sigma-1}^{(v)}). \end{aligned}$$

Оба выражения в скобках ввиду (5) равны нулю, что и требовалось доказать.

В качестве примера мы приведем здесь Р-схему, соответствующую QD-схеме на стр. 12:

$p_0^{(v)}$	$p_1^{(v)}$	$p_2^{(v)}$
1		
1	$z - 1$	
1	$z - 2$	$z^2 - z - 1$
1	$z - 1,5$	$z^2 - z - 1$
1	$z - 1,666667$	$z^2 - z - 1$
1		

<sup>1)</sup> Доказательство формулы (6) для случая  $\sigma = 1$ , которое здесь заканчивается, по чисто формальным соображениям следовало бы рассмотреть отдельно. — Прим. перев.

На этом примере можно заметить следующее фундаментальное свойство QD-алгоритма, которое мы докажем позже (§ 7):

Если

$$f(z) = \sum_0^{\infty} \frac{s_n}{z^{n+1}}$$

является рациональной функцией со знаменателем  $N(z) = z^n + \dots$ , то в Р-схеме в столбце  $p_n^{(v)}$  для всех  $v$  стоит один и тот же многочлен, а именно  $N(z)$ .

### § 5. Связь с теорией непрерывных дробей

Из формул (7) следует, что для фиксированного  $v$  многочлены  $p_{\sigma}^{(v)}(z)$  можно рассматривать как знаменатели подходящих дробей непрерывной дроби типа  $J^1$ :

$$f_v = \frac{s_v}{|z - q_1^{(v)}|} - \frac{e_1^{(v)}q_1^{(v)}}{|z - q_2^{(v)} - e_1^{(v)}|} - \frac{e_2^{(v)}q_2^{(v)}}{|z - q_3^{(v)} - e_2^{(v)}|} - \dots \quad (8)$$

Эту дробь можно рассматривать как «четную форму» непрерывной дроби типа  $S$ :

$$f_v = \frac{s_v}{|z|} - \frac{q_1^{(v)}}{|1|} - \frac{e_1^{(v)}}{|z|} - \frac{q_2^{(v)}}{|1|} - \frac{e_2^{(v)}}{|z|} - \dots, \quad (9)$$

в которую первую дробь можно преобразовать<sup>2)</sup>. Образуя «нечетную форму» дроби (9), получаем

$$f_v = \frac{s_v}{z} \left\{ 1 + \frac{q_1^{(v)}}{|z - q_1^{(v)} - e_1^{(v)}|} - \frac{e_1^{(v)}q_2^{(v)}}{|z - q_2^{(v)} - e_2^{(v)}|} - \frac{e_2^{(v)}q_3^{(v)}}{|z - q_3^{(v)} - e_3^{(v)}|} - \dots \right\} \quad (9a)$$

и, в силу (4),

$$zf_v - s_v = \frac{s_{v+1}}{|z - q_1^{(v+1)}|} - \frac{e_1^{(v+1)}q_1^{(v+1)}}{|z - q_2^{(v+1)} - e_1^{(v+1)}|} - \frac{e_2^{(v+1)}q_2^{(v+1)}}{|z - q_3^{(v+1)} - e_2^{(v+1)}|} - \dots,$$

<sup>1)</sup> Ср. Уолл ([8], § 50—51).

<sup>2)</sup> Ср. Уолл ([8], § 96, особенно формулы (96.6), (96.12) и (96.13)).

а это, очевидно, есть не что иное, как использованная в (8) форма записи непрерывной дроби  $f_{v+1}$ . Мы нашли, таким образом, соотношение

$$f_{v+1} = z f_v - s_v,$$

которое должно формально выполняться и для рядов

$$f_v(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s_{v+n}}{z^{n+1}},$$

соответствующих непрерывным дробям  $f_v$ . Сравнение коэффициентов немедленно дает  $s_{v+n} = s_{v+n}$ , и тем самым доказана

**Теорема 1.** Разложения (8) – (9) являются непрерывными дробями типа  $J$  и  $S$ , соответствующими ряду

$$f_v(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s_{v+n}}{z^{n+1}}. \quad (10)$$

В частности, непрерывная дробь

$$f_0 = \frac{s_0}{|z|} - \frac{|q_1^{(0)}|}{|1|} - \frac{|e_1^{(0)}|}{|z|} - \frac{|q_2^{(0)}|}{|1|} - \dots - \frac{|e_{n-1}^{(0)}|}{|z|} - \frac{|q_n^{(0)}|}{|1|} - \dots$$

соответствует исходному изучаемому ряду

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s_n}{z^{n+1}}.$$

Например, для функции  $z/(z^2 - z - 1)$  из QD-схемы с числами Фибоначчи (стр. 12) получается следующая конечная непрерывная дробь типа  $S$ :

$$\frac{1}{|z|} - \frac{1}{|1|} - \frac{1}{|z|} - \frac{1}{|1|}.$$

Установленная связь позволяет применить к QD-алгоритмам некоторые известные результаты из теории непрерывных дробей. В частности, величины  $e_{\sigma}^{(v)} q_{\sigma}^{(v)}$ , являющиеся числителями непрерывной дроби (8), связаны с коэффициентами  $s_n$  разложения (10) функции  $f_v$ , представляющей этой дробью<sup>1)</sup>, следующим образом:

<sup>1)</sup> Ср. Уолл ([8], § 42, и в частности формулы (42.3) и (42.7)).

$$e_{\sigma}^{(v)} q_{\sigma}^{(v)} = \frac{H_{\sigma+1}^{(v)} H_{\sigma-1}^{(v)}}{(H_{\sigma}^{(v)})^2}. \quad (11)$$

Здесь  $H_0^{(v)} = 1$  и

$$H_{\sigma}^{(v)} = \begin{vmatrix} s_v & s_{v+1} & \dots & s_{v+\sigma-1} \\ s_{v+1} & s_{v+2} & \dots & s_{v+\sigma} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{v+\sigma-1} & s_{v+\sigma} & \dots & s_{v+2\sigma-2} \end{vmatrix}.$$

Далее, формулы (3) дают

$$s_{\sigma}^{(v)} = e_{\sigma-1}^{(v)} s_{\sigma-1}^{(v+1)} = (e_{\sigma-1}^{(v)} q_{\sigma-1}^{(v)}) s_{\sigma-1}^{(v)}$$

или

$$s_{\sigma}^{(v)} = s_1^{(v)} \prod_{\mu=1}^{\sigma-1} (e_{\mu}^{(v)} q_{\mu}^{(v)}).$$

Поэтому в силу (11)

$$s_{\sigma}^{(v)} = \frac{H_{\sigma}^{(v)}}{H_{\sigma-1}^{(v)}}$$

$$q_{\sigma}^{(v)} = \frac{H_{\sigma}^{(v+1)} H_{\sigma-1}^{(v)}}{H_{\sigma}^{(v)} H_{\sigma-1}^{(v+1)}}, \quad e_{\sigma}^{(v)} = \frac{H_{\sigma+1}^{(v)} H_{\sigma-1}^{(v+1)1}}{H_{\sigma}^{(v)} H_{\sigma}^{(v+1)}}. \quad (12)$$

Из теории непрерывных дробей следует также, что разложение  $\sigma$ -й подходящей дроби для  $f_v$  до члена  $1/z^{2\sigma}$  включительно совпадает с соответствующим рядом (10), точнее,

**Теорема 2.** Справедливо равенство

$$p_{\sigma}^{(v)}(z) f_v(z) = \text{многочлен} + \frac{s_{\sigma+1}^{(v)}}{z^{\sigma+1}} + \dots, \quad (13)$$

т. е.  $\sigma$ -я подходящая дробь непрерывной дроби (8) отличается от  $f_v(z)$  в первом приближении на  $s_{\sigma+1}^{(v)}/z^{2\sigma+1}$ .

<sup>1)</sup> Соотношение (12) можно также доказать, исходя из того факта, что для величин  $q$  и  $e$ , выраженных через  $H$ , справедливы правила ромба из § 3.

**Доказательство.** Мы воспользуемся формулой (51.3) на стр. 196 работы Уолла [8], где  $A_p(z)/B_p(z)$  есть  $p$ -я подходящая дробь непрерывной дроби (51.1), а  $P(1/z)$  — соответствующий ряд. Заменяя используемые у Уолла обозначения:  $p$  на  $\sigma$ ;  $B_p(z)$  на  $p_\sigma^{(v)}(z)$ ;  $P(1/z)$  на  $f_v(z)$ ;  $a_0$  на  $s_v$  — и числители  $a_\sigma$  в непрерывной дроби (51.1) на  $e_\sigma^{(v)}q_\sigma^{(v)}$ , мы придадим формуле (51.3) вид [см. также нашу формулу (8)]

$$f_v(z) p_\sigma^{(v)}(z) = \text{многочлен} + \frac{s_v q_1^{(v)} e_1^{(v)} q_2^{(v)} e_2^{(v)} \dots q_\sigma^{(v)} e_\sigma^{(v)}}{z^{\sigma+1}} + \\ + \text{следующие члены},$$

и в силу соотношения  $s_\sigma^{(v)} q_\sigma^{(v)} e_\sigma^{(v)} = s_{\sigma+1}^{(v)}$  наша теорема доказана.

## § 6. Трудности при образовании QD-схемы

Образование частных в QD-схеме становится, разумеется, невозможным, если одна из величин  $s_\sigma^{(v)}$  обращается в нуль; надо различать, два случая:

a)  $s_\sigma^{(v)} = 0$ , но  $s_\sigma^{(v+1)} \neq 0$ .

В этом случае  $q_\sigma^{(v)} = \infty$  и в QD-схеме не определены все величины, расположенные внутри угла с вершиной  $q_\sigma^{(v)}$  и обращенного раствором направо. Нетрудно установить (см. [8], § 50), что в этом случае для функции  $f_v(z)$  не существует разложения (8) в непрерывную дробь типа  $J$ ;

b)  $s_\sigma^{(v)} = 0$ , для всех  $v \geq \mu$ .

В этом случае QD-схему можно осмысленно продолжать вправо и вниз, приписывая частным  $q_\sigma^{(v)}$  ( $v > \mu$ ), получаемым в результате деления 0 на 0, значения 0. Тогда справа и ниже элемента  $s_\sigma^{(\mu)}$  (подчеркнутого жирной чертой в приводимом ниже примере) будут появляться в QD-схеме только нули. Для непрерывной дроби (8) функции  $f_v(z)$  ( $v > \mu$ ) это означает, что все подходящие дроби  $R_\sigma$ ,  $R_{\sigma+1}$  и т. д. отличаются друг от друга только формально

множителями  $z^n$  в числителе и знаменателе и делаются равными после сокращения на этот множитель. Функция  $f_v(z)$ , как и  $f(z)$ , является в этом случае рациональной.

Обращение в нуль всех  $e_\sigma^{(v)}$  и  $q_\sigma^{(v)}$  справа и ниже какого-либо элемента соответствующим образом отражается на многочленах  $p_\sigma^{(v)}$ . Действительно, если все  $e_\sigma^{(v)}$  обращаются в 0, то  $p_\sigma^{(v)}(z)$  делается независящим от  $v$  [см. (6)]; кроме того, из  $q_\sigma^{(v)} = 0$  следует, что  $p_\sigma^{(v)} = z p_{\sigma-1}^{(v+1)}$ .

ПРИМЕР. QD-схема для  $f(z) = \frac{z^2 + 2}{z^2(z+1)}$

$v$	$s_v$	$q_1^{(v)}$	$e_1^{(v)}$	$s_2^{(v)}$	$q_2^{(v)}$	$d_2^{(v)}$	$e_2^{(v)}$	$s_3^{(v)}$	$q_3^{(v)}$	$d_3^{(v)}$	$e_3^{(v)}$	$s_4^{(v)}$
1												
-1		-1										
-3		-2		2								
+3		-3		3								
-1		+2		6		-3		-1	-6			
-3		-1		0		0		0	0	0	0	0
-1		0		0		0		0	0	0	0	0
+3		0		0		0		0	0	0	0	0

Соответствующая Р-схема

$v$	$p_1^{(v)}$	$p_2^{(v)}$	$p_3^{(v)}$	$p_4^{(v)}$
0				
$z+1$				
$z+3$		$z^2 - 3$		
$z+1$		$z(z+1)$	$z^2(z+1)$	$z^3(z+1)$
$z+1$			$z^2(z+1)$	
			$z(z+1)$	

## § 7. Основные свойства QD-алгоритма

Мы хотим сейчас доказать свойство QD-алгоритма, подмеченное в § 2 на численном примере. Из результатов § 6 непосредственно следует

**Теорема 3.** Если в QD-схеме модифицированные разности  $e_n^{(v)}$  равны нулю для всех  $v$ , то функция

$$f(z) = \sum_0^\infty \frac{s_n}{z^{n+1}}$$

является рациональной и степень ее знаменателя не превосходит  $n$ .

Верно также и обратное утверждение.

**Теорема 4.** Если по коэффициентам  $s_n$  рациональной функции

$$f(z) = \sum_0^{\infty} \frac{s_n}{z^{n+1}},$$

степень знаменателя которой равна  $n$ , построить QD-схему<sup>1)</sup>, то  $n$ -е модифицированные разности  $e_n^{(v)}$  в ней обращаются в нуль для всех  $v$ .

Соответствующая Р-схема обладает тем свойством, что в ней многочлены  $p_n^{(v)}(z)$  для всех  $v$  совпадают со знаменателем  $N(z)$  функции  $f(z)$ .

В частности, условия теоремы 4 выполняются, если  $s_n$  являются константами Шварца конечной матрицы  $A$  по отношению к любым начальным векторам.

**Доказательство теоремы 4.** Если  $f(z)$  рациональна и регулярна в точке  $z=0$ , то рациональны и имеют тот же знаменатель  $N(z)$  все функции  $f_v(z)$ . Непрерывная дробь типа  $J$  (если она вообще существует<sup>2)</sup>) для рациональной функции всегда конечна, а последовательность знаменателей подходящих дробей заканчивается на знаменателе  $N(z)$  самой рациональной функции. Для функций  $f_v(z)$  это означает, что последовательность  $p_\sigma^{(v)}(z)$  для любого  $v$  имеет вид

$$p_\sigma^{(v)} \equiv 1; \quad p_1^{(v)}(z), p_2^{(v)}(z), \dots, p_{n-1}^{(v)}(z), p_n^{(v)}(z) = N(z).$$

Тем самым доказана вторая часть теоремы; первая же часть теперь непосредственно следует из формул (6) для  $\sigma = n$ , так как многочлены  $p_{n-1}^{(v)}(z) = z^{n-1} + \dots$  не обращающиеся тождественно в нуль.

<sup>1)</sup> Если она существует. Если  $z=0$  является полюсом функции  $f(z)$ , то теорема 4 относится к тому случаю, когда QD-схема в соответствии с замечанием б) § 6 заполнена до столбца  $e_n^{(v)}$ .

<sup>2)</sup> Согласно [8], § 41, 42, если непрерывная дробь не существует, то  $H_\sigma^{(v)} = 0$  для некоторого  $\sigma < n$ . Из (12) тогда следует  $s_\sigma^{(v)} = 0$ . Мы, следовательно, имеем дело со случаем а) § 6 (см. стр. 20), так как случае б) непрерывная дробь существует.

Если же  $z=0$  является полюсом степени  $r$  для рациональной функции  $f(z)$ , то функция  $f_r(z)$  оказывается рациональной и регулярной в точке  $z=0$ , причем ее знаменатель имеет степень  $n-r$ . Из первой части доказательства тогда следует, что  $e_{n-r}^{(v)} = 0$  для  $v \geq r$  (а также  $s_{n+1-r}^{(v)} = 0$ ).

Теперь можно заполнить QD-схему в соответствии с пунктом б) § 6 и увидеть, что  $e_{n-r+1}^{(v)} = 0$  для  $v \geq r-1$ , и, далее,  $e_{n-r+2}^{(v)} = 0$  для  $v \geq r-2$  и т. д.; наконец,  $e_n^{(v)} = 0$  для всех  $v > 0$ , что и требовалось доказать.

Из результатов уже упоминавшейся работы Айткена почти непосредственно выводится одно важное свойство QD-схем, которое, в частности, можно использовать для нахождения корней многочленов (ср. гл. II «Применение QD-алгоритма»):

**Теорема 5.** Если функция  $f(z)$  рациональна и модули ее полюсов все различны:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \dots,$$

то для QD-схемы, построенной на коэффициентах  $f(z)$ , справедливы следующие равенства:

$$\left. \begin{array}{l} \lim_{v \rightarrow \infty} q_\sigma^{(v)} = \lambda_\sigma, \\ \lim_{v \rightarrow \infty} e_\sigma^{(v)} = 0, \end{array} \right\} \sigma = 1, 2, 3, \dots \quad (14)$$

**Доказательство.** Из работы Айткена следует, что при сделанных предположениях

$$\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_m = \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{H_m^{(v+1)}}{H_m^{(v)}}.$$

Написав это равенство для  $m = \sigma$  и  $m = \sigma - 1$  и поделив одно на другое, мы в силу (12) немедленно получим первое из с. отношений (14). Для доказательства второго утверждения рассмотрим отношения

$$\frac{e_\sigma^{(\sigma+1)}}{e_\sigma^{(\sigma)}} = \frac{q_{\sigma+1}^{(\sigma)}}{q_\sigma^{(\sigma+1)}},$$

которые при  $v \rightarrow \infty$  стремятся к  $\lambda_{\sigma+1}/\lambda_\sigma$ . Таким образом,  $e_\sigma^{(\sigma)}$  стремится к 0 как  $(\lambda_{\sigma+1}/\lambda_\sigma)^v$ .

Утверждение теоремы 5 может быть обобщено следующим образом:

**Теорема 6.** Допустим, что функция

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s_n}{z^{n+1}}$$

может быть представлена в виде  $f(z) = R(z) + \varphi(z)$ , где  $R(z)$  — регулярная в круге  $|z| < R$  рациональная функция со знаменателем  $N(z) = z^n + \dots$ , а  $\varphi(z)$  — регулярная для  $|z| \geq \theta R$  ( $\theta < 1$ ), но не обязательно рациональная функция.

Тогда

$$\lim_{v_j \rightarrow \infty} p_n^{(v_j)}(z) = N(z), \quad (15)$$

если только существует QD-схема и многочлены  $p_\sigma^{(v)}(z)$  ( $\sigma = 0, 1, 2, \dots, n$ ) определены для бесконечного множества значений  $v_j$  индекса  $v$ .

Доказательство этого утверждения можно заимствовать из уже упоминавшейся работы Адамара ([2], § 14–21), где рассматривается функция  $f(z)$ , разложенная по возрастающим степеням  $z$ . Встречающиеся у Адамара многочлены

$$\mathfrak{P}_m = 1 + A_m^{(1)}z + A_m^{(2)}z^2 + \dots + A_m^{(p)}z^p,$$

$$\mathfrak{P}'_m = 1 + A'_m{}^{(1)}z + A'_m{}^{(2)}z^2 + \dots + A'_m{}^{(q)}z^q,$$

коэффициенты которых определяются равенствами (18) и (18') из [2], соответствуют применяемым в этой работе многочленам  $p_p^{(m)}(z)$ ,  $p_q^{(m)}(z)$ , причем индексы  $p$ ,  $q$  определяются из условий

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| = \dots = |\lambda_p| = q > |\lambda_{p+1}| = |\lambda_{p+2}| = \dots \\ \dots = |\lambda_q| = q' > |\lambda_{q+1}| = \dots = q'' > \dots$$

Адамар доказывает, что эти многочлены  $\mathfrak{P}_m$  и  $\mathfrak{P}'_m$  стремятся при  $m \rightarrow \infty$  к многочленам  $\mathfrak{P}$  и  $\mathfrak{P}'$ , нули которых совпадают с первыми  $p$  (соответственно  $q$ ) полюсами функции  $f(z)$ , причем скорость сходимости соответствует геометрическим прогрессиям со знаменателем  $q'/q$  (соответственно  $q''/q'$ ).

Из теоремы 6 получаются следующие утверждения, которые мы приводим здесь без доказательства.

**Следствие 1.** Для выполнения соотношений (14) для одного  $\sigma = k$  достаточно, чтобы  $|\lambda_{k-1}| > |\lambda_k| > |\lambda_{k+1}|$ .

**Следствие 2.** По величинам  $q_\sigma^{(v)}$ ,  $e_\sigma^{(v)}$  какой-либо QD-схемы построим многочлены  $\hat{p}_\sigma^{(v)}(z)$  аналогично формулам (5):

$$\left. \begin{aligned} \hat{p}_m^{(v)}(z) &\equiv 1 \text{ для всех } v, \\ \hat{p}_\sigma^{(v)}(z) &= z\hat{p}_{\sigma-1}^{(v+1)}(z) - q_\sigma^{(v)} \hat{p}_{\sigma-1}^{(v)}(z) \end{aligned} \right\} \text{для } \sigma = m+1, \dots, n. \quad (16)$$

Тогда если

$$|\lambda_m| > |\lambda_{m+1}| \geq |\lambda_{m+2}| \geq \dots \geq |\lambda_n| > |\lambda_{n+1}| \dots,$$

то выполняется соотношение

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \hat{p}_n^{(v)}(z) = (z - \lambda_{m+1})(z - \lambda_{m+2}) \dots (z - \lambda_n). \quad (17)$$

### § 8. Связь с ВО-алгоритмом Ланцоша

Как уже говорилось в § 4, Ланцошем предложен способ нахождения характеристического многочлена матрицы  $A$  по константам Шварца  $s_v$  (у Ланцоша они обозначаются через  $c_v$ ). Им указывается правило построения по  $s_v$  некоторых многочленов  $p_0 \equiv 1$ ,  $p_1(z)$ ,  $p_2(z)$ ,  $\dots$ , последний из которых  $p_m(z)$  совпадает с минимальным многочленом матрицы  $A$ .

Из системы уравнений (48) работы [5], которым должны удовлетворять коэффициенты многочлена

$$p_\sigma(z) = z^\sigma + \eta_{\sigma-1} z^{\sigma-1} + \dots + \eta_1 z + \eta_0,$$

следует, что  $p_\sigma(z)$  есть не что иное, как знаменатели подходящих дробей непрерывной дроби типа  $J$  для функции

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{z^{n+1}}.$$

Другими словами, многочлены  $p_\sigma(z)$  Ланцоша совпадают с многочленами  $p_\sigma^{(0)}(z)$  QD-схемы, построенной на  $c_n$ . Даль-

нейший анализ показывает, что в используемых здесь обозначениях схема Ланцоша может быть записана так<sup>1)</sup>:

	0	0,5	1	1,5	2	2,5
$h_i =$	$s_1^{(0)}$	$s_1^{(1)}$	$s_2^{(0)}$	$s_2^{(1)}$	$s_3^{(0)}$	$s_3^{(1)}$
$q_j =$	$-q_1^{(0)}$	$-e_1^{(0)}$	$-q_2^{(0)}$	$-e_2^{(0)}$	$-q_3^{(0)}$	$-e_3^{(0)}$
$s_0$	1	0	0	0	0	0
$s_1$		1		0	0	0
$s_2$					0	
			коэффициенты многочлена $p_1^{(0)}(z)$	коэффициенты многочлена $p_1^{(1)}(z)$	коэффициенты многочлена $p_2^{(0)}(z)$	коэффициенты многочлена $p_2^{(1)}(z)$

(18)

Ланцош далее показал, что при выполнении ВО-алгоритма с теми же начальными векторами  $x_0, y_0$ , по которым вычислялись константы Шварца  $s_n$  матрицы  $A$ , также появляются многочлены  $p_\sigma^{(0)}(z)$ <sup>2)</sup>. Далее, так как эти многочлены связаны с элементами  $\alpha_\sigma, \beta_\sigma$  кодиагональной матрицы соотношениями

$$p_1^{(0)}(z) - (z - \alpha_1) p_0^{(0)} = 0,$$

$$p_{\sigma+1}^{(0)}(z) - (z - \alpha_{\sigma+1}) p_\sigma^{(0)}(z) + \beta_\sigma p_{\sigma-1}^{(0)}(z) = 0, \quad \sigma = 1, 2, \dots,$$

то сравнение с равенствами (7) указывает на следующую связь между образующейся в ВО-алгоритме кодиагональной формой матрицы  $A$  и величинами  $q_\sigma^{(0)}, e_\sigma^{(0)}$  при прове-

<sup>1)</sup> См. [4], стр. 263, или [5], стр. 176.

<sup>2)</sup> Эти многочлены обозначены через  $p_{\sigma+1}(\lambda)$  в работе [6], стр. 41.

дении QD-алгоритма с теми же начальными векторами:

$$\alpha_1 = q_1^{(0)}, \quad \alpha_\sigma = q_\sigma^{(0)} + e_{\sigma-1}^{(0)}, \quad \beta_\sigma = q_\sigma^{(0)} e_\sigma^{(0)}, \quad \sigma = 1, 2, \dots. \quad (19)$$

Эти формулы позволяют несколько упростить запись (8) непрерывной дроби типа  $J$  для функции  $f(z)$ :

$$f(z) = \frac{s_0}{|z - \alpha_1|} - \frac{\beta_1}{|z - \alpha_2|} - \frac{\beta_2}{|z - \alpha_3|} - \dots$$

Нетрудно видеть, что не только величины  $q_\sigma^{(0)} + e_{\sigma-1}^{(0)}$  и  $q_\sigma^{(0)} e_\sigma^{(0)}$ , но и

$$\left. \begin{aligned} \alpha_\sigma^{(v)} &= q_\sigma^{(v)} + e_{\sigma-1}^{(v)}, \\ \beta_\sigma^{(v)} &= q_\sigma^{(v)} e_\sigma^{(v)}, \end{aligned} \right\} \sigma = 1, 2, \dots; \quad v = 0, 1, \dots \quad (20)$$

имеют в ВО-алгоритме вполне определенный смысл, а именно, это кодиагональные элементы, которые получаются, если ВО-алгоритмы применять не к начальным векторам  $x, y$ , а к векторам  $A^k x$  и  $(A^*)^{v-k} y$ <sup>1)</sup>.

### § 9. Связь с cg-алгоритмом<sup>2)</sup>

Связь, существующая между cg-алгоритмом и непрерывными дробями (см. [3], § 18), наводит на мысль о существовании связи и между cg- и QD-алгоритмами.

Пусть  $A$  — действительная симметрическая матрица. С помощью начальных векторов  $x$  и  $y = x$  образуем константы Шварца  $s_v$  и построим на них QD-схему. Кроме того, отправляясь от того же начального вектора  $r_0 = x$ , но не решая систему уравнений, проведем cg-алгоритм (см. формулы 5.1 в работе [3]). Получающиеся при этом векторы невязок  $r_i$  удовлетворяют, согласно формулам (5.8) и (5.9) из [3], соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} Ar_0 &= -\frac{1}{a_0} r_1 + \frac{1}{a_0} r_0, \\ Ar_i &= -\frac{1}{a_i} r_{i+1} + \left( \frac{1}{a_i} + \frac{b_{i-1}}{a_{i-1}} \right) r_i - \frac{b_{i-1}}{a_{i-1}} r_{i-1}, \quad i = 1, 2, \dots, \\ (r_i, r_j) &= 0 \quad \text{для } i \neq j. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

<sup>1)</sup> Число  $v$  влияет на биортогональную систему, но не на самое кодиагональную матрицу.

<sup>2)</sup> cg-алгоритм — это метод сопряженных градиентов Штифеля — Хестенеса (см. [3]).

Те же самые векторы  $\mathbf{r}_i$  получаются и при выполнении ВО-алгоритма (формулы (2'), (3') из [6]), если только при этом заменить  $s_{k+1}$  на  $-1/a_{k-1}$ . Действительно, в силу  $A = A^*$  имеем

$$\left. \begin{aligned} Ax_1 &= -\frac{1}{a_0} x_2 + a_1 x_1, \\ Ax_\sigma &= -\frac{1}{a_{\sigma-1}} x_{\sigma+1} + a_\sigma x_\sigma + \gamma_{\sigma-1} x_{\sigma-1}, \quad \sigma = 2, 3, \dots, \\ (x_i, x_j) &= 0 \quad \text{для } i \neq j. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Сравнивая формулы (21) и (22), получаем следующую связь между встречающимися в сг- и ВО-алгоритмах величинами:

$$\left. \begin{aligned} x_{\sigma+1} &= r_\sigma, \quad a_1 = \frac{1}{a_0}, \quad a_{\sigma+1} = \frac{1}{a_\sigma} + \frac{b_{\sigma-1}}{a_{\sigma-1}}, \\ \gamma_\sigma &= -\frac{b_{\sigma-1}}{a_{\sigma-1}} \quad \text{или} \quad \beta_\sigma = \frac{b_{\sigma-1}}{a_{\sigma-1}^2}. \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

Дальнейшее сравнение с формулами (19) позволяет, наконец, установить связь между величинами  $q, e$  в QD-алгоритме и весовыми коэффициентами  $a, b$  в сг-алгоритме:

$$q_\sigma^{(0)} = \frac{1}{a_{\sigma-1}}, \quad e_\sigma^{(0)} = \frac{b_{\sigma-1}}{a_{\sigma-1}}, \quad \sigma = 1, 2, \dots. \quad (24)$$

## § 10. Теорема сложения для непрерывных дробей

Рассмотрим конечную непрерывную дробь типа  $J$ :

$$f(z) = \frac{s}{|z-a_1|} - \frac{\beta_1}{|z-a_2|} - \frac{\beta_2}{|z-a_3|} - \dots - \frac{\beta_{n-2}}{|z-a_{n-1}|} \quad (25)$$

и дробь  $g(z) = c/(z-\lambda)$  и поставим себе задачу получить непрерывную дробь для суммы  $f(z) + g(z)$  непосредственно, без использования какого-либо обходного пути вроде разложения в бесконечный ряд или записи суммы  $f(z) + g(z)$  в виде одной дроби. Для этого введем сначала новую переменную  $\zeta = z - \lambda$ ;  $f(z) + g(z)$  преобразуется

тогда к виду

$$\left. \begin{aligned} &\frac{s}{|\zeta+\lambda-a_1|} - \frac{\beta_1}{|\zeta+\lambda-a_2|} - \dots - \frac{\beta_{n-2}}{|\zeta+\lambda-a_{n-1}|} = \\ &= \frac{1}{\zeta} \left( c + \frac{s\zeta}{|\zeta+\lambda-a_1|} - \frac{\beta_1}{|\zeta+\lambda-a_2|} - \dots - \frac{\beta_{n-2}}{|\zeta+\lambda-a_{n-1}|} \right). \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Непрерывную дробь для  $c f(\zeta + \lambda)$  преобразуем по формулам (9а) § 5 с использованием непрерывной дроби типа  $S$  для  $f(\zeta + \lambda)$ . Прежде всего

$$f(\zeta + \lambda) = \frac{s}{|\zeta|} - \frac{q_1}{|1|} - \frac{e_1}{|\zeta|} - \frac{q_2}{|1|} - \dots - \frac{e_{n-2}}{|\zeta|} - \frac{q_{n-1}}{|1|}, \quad (27)$$

где  $q$  и  $e$  в соответствии с формулами (19), но с учетом сдвига на  $\lambda$  вычисляются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} q_1 &= a_1 - \lambda \\ q_\sigma e_\sigma &= \beta_\sigma \\ q_{\sigma+1} + e_\sigma &= a_{\sigma+1} - \lambda \end{aligned} \right\} \quad \sigma = 1, 2, \dots, n-2. \quad (28)$$

Из (27) и (9а) теперь получаем

$$c f(\zeta + \lambda) = s + \frac{s q_1}{|\zeta - q_1 - e_1|} - \frac{e_1 q_2}{|\zeta - q_2 - e_2|} - \dots - \frac{e_{n-2} q_{n-1}}{|\zeta - q_{n-1}|},$$

следовательно,

$$\begin{aligned} f + g &= \frac{1}{\zeta} \left\{ c + s + \frac{s q_1}{|\zeta - q_1 - e_1|} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{e_1 q_2}{|\zeta - q_2 - e_2|} - \dots - \frac{e_{n-2} q_{n-1}}{|\zeta - q_{n-1}|} \right\}. \end{aligned} \quad (29)$$

Если мы предположим теперь, что  $f + g$  уже разложена в непрерывную дробь типа  $S$  (содержащую, разумеется,  $2n$  частичных дробей):

$$f + g = \frac{s^*}{|\zeta|} - \frac{q_1^*}{|1|} - \frac{e_1^*}{|\zeta|} - \frac{q_2^*}{|1|} - \dots - \frac{e_{n-1}^*}{|\zeta|} - \frac{q_n^*}{|1|}, \quad (30)$$

то сможем ее также преобразовать по формулам (9а) к виду

$$f + g = \frac{1}{\zeta} \left\{ s^* + \frac{s^* q_1^*}{|\zeta - q_1^* - e_1^*|} - \frac{e_1^* q_2^*}{|\zeta - q_2^* - e_2^*|} - \dots - \frac{e_{n-1}^* q_n^*}{|\zeta - q_n^*|} \right\}. \quad (31)$$

Сравнивая (29) и (31), мы получаем, наконец, формулы, которые позволяют последовательно вычислить все  $s^*$ ,  $q^*$ ,  $e^*$ :

$$\left. \begin{array}{l} c + s = s^*, \\ q_1^* + e_1^* = q_1 + e_1, \\ q_2^* + e_2^* = q_2 + e_2, \\ \vdots \\ q_{n-1}^* + e_{n-1}^* = q_{n-1}, \end{array} \quad \begin{array}{l} s^* q_1^* = sq_1, \\ e_1^* q_2^* = e_1 q_2, \\ e_2^* q_3^* = e_2 q_3, \\ \vdots \\ e_{n-2}^* q_{n-1}^* = e_{n-2} q_{n-1}, \\ (q_n^* = 0). \end{array} \right\} \quad (32)$$

Формулы (32) можно рассматривать как «сдвинутые правила ромба»: если расположить величины  $s$ ,  $c$ ,  $q$ ,  $e$ ,  $s^*$ ,  $q^*$ ,  $e^*$  в следующем порядке:

$$\left. \begin{array}{c} c \\ s \\ s^* \quad q_1 \\ q_1^* \quad e_1 \\ e_1^* \\ \vdots \\ q_{n-1} \\ q_{n-1}^* \\ e_{n-1}^* \end{array} \right\}, \quad (33)$$

то для них будут выполняться правила ромба из § 3, а именно

$Q$ -правило для ромбов  $q_\sigma^*$      $\begin{matrix} q_\sigma \\ e_\sigma^* \end{matrix}$      $e_\sigma$  и     $\begin{matrix} c \\ s^* \end{matrix}$      $s$ ,

$E$ -правило для ромбов  $e_{\sigma-1}^*$      $\begin{matrix} e_{\sigma-1} \\ q_\sigma^* \end{matrix}$      $q_\sigma$  и     $\begin{matrix} s \\ q_1^* \end{matrix}$      $q_1$ .

Преобразуя непрерывную дробь (30) снова в дробь типа  $J$  и вводя старую переменную  $z = \zeta + \lambda$ , получаем

$$f + g = \frac{s^*}{|z - a_1^*|} - \frac{\beta_1^*}{|z - a_2^*|} - \frac{\beta_2^*}{|z - a_3^*|} - \cdots - \frac{\beta_{n-1}^*}{|z - a_n^*|}, \quad (34)$$

где

$$\left. \begin{array}{l} a_\sigma^* = q_\sigma^* + e_{\sigma-1}^* + \lambda, \\ \beta_\sigma^* = q_\sigma^* e_\sigma^*, \\ a_n^* = e_{n-1}^* + \lambda. \end{array} \right\} \sigma = 1, 2, \dots, n-1,$$

## Глава II

## ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМА ЧАСТНЫХ И РАЗНОСТЕЙ

§ 1. Преобразование степенного ряда  
в непрерывную дробь

Пусть нам дана регулярная в бесконечности функция

$$\sum_0^{\infty} \frac{s_n}{z^{n+1}} = f(z). \quad (1)$$

Применение QD-схемы к коэффициентам  $s_n$  дает нам все необходимые величины для записи непрерывной дроби типа  $S$  для функции  $f(z)$  [см. формулы (1.9)], а именно

$$f(z) = \frac{s_0}{|z|} - \frac{|q_1^{(0)}|}{|1|} - \frac{|e_1^{(0)}|}{|z|} - \frac{|q_2^{(0)}|}{|1|} - \frac{|e_2^{(0)}|}{|z|} - \dots \quad (2)$$

Во многих случаях это можно делать даже тогда, когда ряд (1) для функции  $f(z)$  всюду расходится; например, для функции

$$f(z) = \frac{1}{z} - \frac{1}{z^2} + \frac{2!}{z^3} - \frac{3!}{z^4} + \dots$$

(асимптотический ряд для  $e^z \int_z^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx$ )

QD-схема выглядит следующим образом:

$q_1^{(v)}$	$e_1^{(v)}$	$q_2^{(v)}$	$e_2^{(v)}$	$q_3^{(v)}$	
1					
-1		-1			
-2		-2			
2		-1	-2		
-3		-3	-2	-3	в общем случае
-6		-1	-2	-4	$q_{\sigma}^{(v)} = -(\sigma + v)$
-4		-4	-4		$e_{\sigma}^{(v)} = -\sigma$
24		.	-2		
.	.	.	.	-5	
.	.	.	.	.	
.	.	.	.	.	

Следовательно, по формуле (2)

$$f(z) = \frac{1}{|z|} + \frac{1}{|1|} + \frac{1}{|z|} + \frac{2}{|1|} + \frac{2}{|z|} + \frac{3}{|1|} + \frac{3}{|z|} + \dots$$

Эта непрерывная дробь сходится для всех  $z$ , не лежащих на отрицательной части действительной оси (ср. [8], § 93).

Если надо разложить в непрерывную дробь регулярную в точке  $z = 0$  функцию

$$f(z) = \sum_0^{\infty} s_n z^n,$$

то можно образовать вспомогательную функцию

$$\frac{1}{u} f\left(\frac{1}{u}\right) = \sum_0^{\infty} \frac{s_n}{u^{n+1}}$$

и для нее построить непрерывную дробь

$$\frac{1}{u} f\left(\frac{1}{u}\right) = \frac{s_0}{|u|} - \frac{|q_1^{(0)}|}{|1|} - \frac{|e_1^{(0)}|}{|u|} - \frac{|q_2^{(0)}|}{|1|} - \dots$$

Заменив здесь опять  $u$  на  $1/z$  и несколько преобразовав эту дробь (точнее, умножив все нечетные частичные дроби

на  $z$ ), мы получим требуемое выражение:

$$\sum_0^{\infty} s_n z^n = \frac{s_0}{|1|} - \frac{zq_1^{(0)}}{|1|} - \frac{ze_1^{(0)}}{|1|} - \frac{zq_2^{(0)}}{|1|} - \frac{ze_2^{(0)}}{|1|} - \dots . \quad (3)$$

Применив, например, QD-схему для коэффициентов функции

$$e^z = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \frac{z^3}{3!} + \dots,$$

мы вычислим величины

$$q_1^{(v)} = \frac{1}{v+1}, \quad q_{\sigma}^{(v)} = \frac{v+\sigma-1}{(v+2\sigma-2)(v+2\sigma-1)},$$

$$e_{\sigma}^{(v)} = \frac{-\sigma}{(v+2\sigma-1)(v+2\sigma)},$$

подставим их в (3) и получим известную непрерывную дробь

$$e^z = \frac{1}{|1|} - \frac{z}{|1|} + \frac{z/2}{|1|} - \frac{z/6}{|1|} + \frac{z/6}{|1|} - \frac{z/10}{|1|} + \frac{z/10}{|1|} - \dots.$$

## § 2. Суммирование плохо сходящихся рядов

Во многих задачах прикладной математики даже геометрические прогрессии нельзя считать достаточно хорошо сходящимися. Так, например, для вычисления суммы ряда  $\sum_0^{\infty} 2^{-v}$  с точностью до  $10^{-8}$  требуется просуммировать около 20 членов. QD-алгоритм является практически полезным способом суммирования бесконечных рядов, которые ведут себя приблизительно как геометрическая прогрессия (т. е. отношение двух последовательных членов ряда меняется медленно).

Этот способ принадлежит Стильтесу, который применял его в основном для суммирования расходящихся рядов (см. [8], § 93):

<sup>1)</sup> Совершенно ясно, что эта связь (т. е. соответствие между рядом и непрерывной дробью) чисто формальная. Условия, при которых из этого соответствия следует равенство, можно найти в [15], § 64.

Чтобы просуммировать ряд  $\sum_0^{\infty} s_n$ , надо разложить функцию

$$f(z) = \sum_0^{\infty} \frac{s_n}{z^{n+1}}$$

непрерывную дробь типа  $J$  или  $S$  и положить  $z = 1$ .

В качестве примера рассмотрим ряд, несколько старших членов которого здесь выписаны:

$$0,775551 + 0,587903 + 0,451730 + 0,350836 + \\ + 0,274795 + 0,216681 + \dots$$

Строим QD-схему:

$s_v$	$q_1^{(v)}$	$e_1^{(v)}$	$q_2^{(v)}$	$e_2^{(v)}$	$q_3^{(v)}$
0,775551		0,7580456			
0,587903		0,0103295			
0,451730		0,7683751	0,6155258		
0,350836		0,0082747	0,0129556		
0,274795		0,7766498	0,6202067	0,4790043	
0,216681		0,0066079	0,0100060		
	0,7832577	0,6236048			
	0,7885187	0,0052610			

Выписав дробь (2) и положив  $z = 1$ , мы получим число

$$\sum_0^{\infty} s_v = \frac{0,775551}{|1|} - \frac{0,7580456}{|1|} - \frac{0,0103295}{|1|} - \\ - \frac{0,6155258}{|1|} - \frac{0,0129556}{|1|} - \frac{0,4790043}{|1|} \approx 3,52348,$$

совпадающее до последнего знака с истинной суммой, вычисленной другим методом.

Для некоторых рядов (например, для  $1 - 1! + 2! - 3! + 4! - \dots$ ) получаемые таким образом непрерывные дроби сходятся плохо. В таких случаях можно повторить суммирование Стильтеса, т. е. непрерывную дробь известными способами преобразовать в ряд (см. Уолл [8], § 2), и этот ряд снова просуммировать по Стильтесу. Такой способ повторного суммирования совпадает по существу с методом Д. Шанкса [9], [10].

### § 3. Решение алгебраических уравнений

Пусть требуется определить корни многочлена  $N(z) = z^n + \dots$ . Представляется целесообразным образовать рациональную функцию  $f(z) = N_1(z)/N(z)$ , числитель которой является произвольным многочленом степени  $n-1$ , разложить эту функцию в степенной ряд  $\sum_0^{\infty} s_n z^{n+1}$  и с помощью QD-алгоритма найти полюсы функции  $f(z)$  (в соответствии с теоремой 5 гл. I эти полюсы получаются как пределы  $\lim_{v \rightarrow \infty} q_{\sigma}^{(v)}$ ).

К сожалению, этот способ во многих случаях оказывается невыполнимым, так как образование «высших» частных  $q_2^{(v)}, q_3^{(v)}, q_4^{(v)}, \dots$  при больших  $v$  сопровождается, как правило, большой потерей точности. Этот факт проиллюстрирован на следующем примере.

ПРИМЕР. Определение полюсов функции

$$\frac{z^2 + 3z + 1}{z^3 - 9z^2 - 8z + 2} = \frac{1}{z} + \frac{12}{z^2} + \frac{117}{z^3} + \dots .$$

Соответствующая QD-схема (упрощенная форма) при проведении выкладок с шестью значащими цифрами выглядит следующим образом:

$s_v$	$q_1^{(v)}$	$e_1^{(v)}$	$q_2^{(v)}$	$e_2^{(v)}$	$q_3^{(v)}$	$e_3^{(v)}$
1	12					
12	-2,25					
9,75		-0,231487				
117	0,05342		-1,23826			
9,80342		-1,52318		0,716621		
1147	-0,00830		0,582573		0,158641	
9,79512		-0,932307		0,292689		
11235	0,00079		-0,182893			
9,79591		-1,11599				
110057	-0,00009					
9,79582						
1078099						

Величина  $q_1^{(v)}$  действительно стремится к корню многочлена  $z^3 - 9z^2 - 8z + 2$ , однако, вследствие того что вели-

чины  $e_1^{(v)}$  очень малы и поэтому относительно неточны, неадекватны все числа, стоящие правее  $e_1^{(v)}$ . В частности,  $e_3^{(v)}$  даже не равна нулю, как это должно было бы быть согласно теории (гл. I, теорема 4).

### § 4. Прогрессивная форма QD-алгоритма

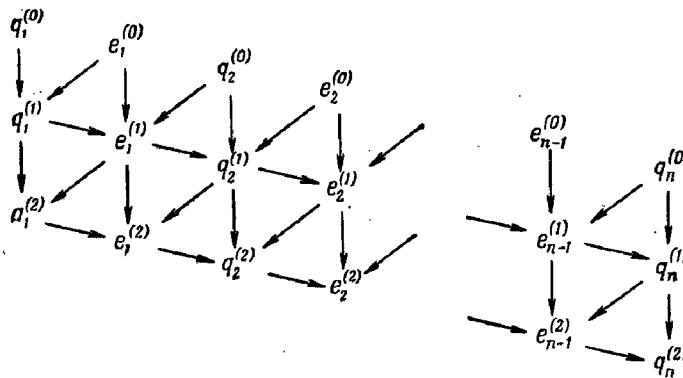
Мало обнадеживающие результаты предыдущего параграфа могут быть, однако, существенно улучшены, если, используя формулы (4) гл. I, мы будем по наклонной строке QD-схемы (упрощенная форма) заполнять следующую строку, расположенную непосредственно под данной. Для этого надо формулы (4) гл. I лишь немногого перестроить и затем применять для  $\sigma = 1, 2, 3, \dots$ , учитывая равенство  $e_0^{(v+1)} = 0$ ,

$$\left. \begin{aligned} q_{\sigma}^{(v+1)} &= q_{\sigma}^{(v)} + e_{\sigma}^{(v)} - e_{\sigma-1}^{(v+1)}, \\ e_{\sigma}^{(v+1)} &= \frac{e_{\sigma}^{(v)} q_{\sigma+1}^{(v)}}{q_{\sigma}^{(v+1)}}. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Таким образом, если известны все величины  $q_{\sigma}^{(0)}$  и  $e_{\sigma}^{(0)}$ , стоящие в верхней наклонной строке, с помощью формул (4) можно заполнить всю QD-схему сверху вниз (а не справа налево). Эта форма QD-алгоритма, называемая в дальнейшем *прогрессивной*, особенно предпочтительна в тех случаях, когда  $s_v$  являются коэффициентами рациональной функции. Согласно теореме 4 гл. I, QD-схема тогда ограничена справа (т. е.  $e_n^{(v)} = 0$  для фиксированного  $n$  и всех  $v$ ), так что требуется только конечное число операций для заполнения каждой новой наклонной строки<sup>1)</sup>.

Схематически этот процесс представлен схемой на стр. 38 (стрелки указывают, какие величины используются при вычислении каждого нового элемента схемы):

1) Ф. А. Бауэр предложил прогрессивный (т. е. рекуррентный по  $v$ ) способ вычисления определенных в § 4 гл. I многочленов  $p_{\sigma}^{(v)}(z)$ . [Им использованы формулы (5) гл. I.] Последовательное развитие этой идеи приводит к существенно более общему методу определения корней многочленов (см. [22]).



### § 5. Решение алгебраических уравнений с помощью прогрессивной формы QD-алгоритма

Вернемся снова к задаче решения алгебраического уравнения  $N(z) = 0$  с помощью определения полюсов функции  $f(z) = N_1(z)/N(z)$ . Хорошо приспособленным для этой цели инструментом является прогрессивная форма QD-алгоритма, так как с ее помощью естественно и без существенной потери точности можно вычислить  $q_\sigma^{(v)}$  для больших  $v$ . Нули многочлена  $N(z)$ , если только они не равны по абсолютной величине, вычисляются таким путем с любой степенью точности. Проблемой остается лишь вычисление начальных значений величин  $q_\sigma^{(0)}$  и  $e_\sigma^{(0)}$ . Формула (2), однако, показывает, что  $q_\sigma^{(0)}$  и  $e_\sigma^{(0)}$  можно вычислить, разлагая рациональную функцию  $N_1(z)/N(z)$  в непрерывную дробь типа  $S$  с помощью следующего алгоритма:

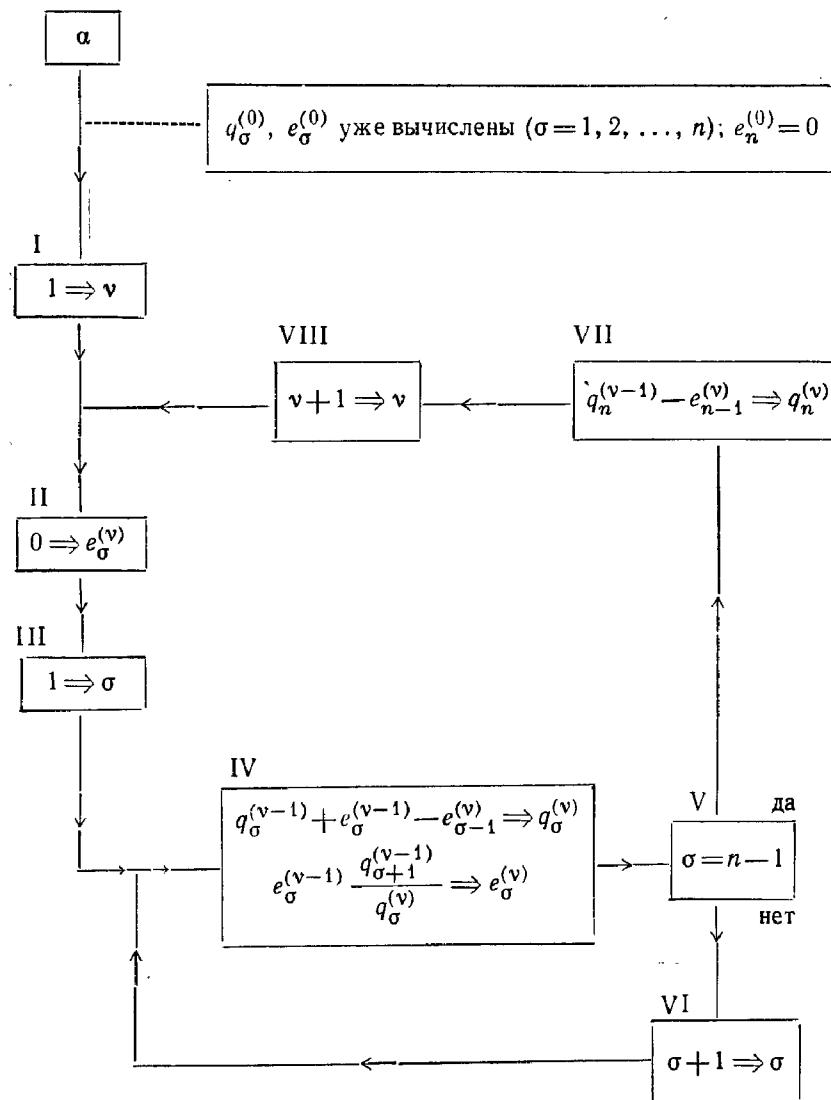
Отправляемся от многочленов

$N_1(z) = z^{n-1} + \dots$  и  $N^*(z) = N(z) = z^n + \dots$ , строим последовательно для  $k = 1, 2, 3, \dots$  многочлены  $N_k(z)$  и  $N_k^*(z)$  степени  $n - k$  по формулам

$$\left. \begin{aligned} N_k^*(z) &= \frac{zN_k(z) - N_{k-1}^*(z)}{q_k}, \quad k = 1, 2, \dots, n, \\ N_{k+1}(z) &= \frac{N_k^*(z) - N_k(z)}{e_k}, \quad k = 1, 2, \dots, n-1. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Величины  $q_k$  и  $e_k$  определяются при этом однозначно, если дополнительно потребовать, чтобы коэффициенты при старшем члене всех многочленов  $N_k$  и  $N_k^*$  равнялись 1.

Блок-схема прогрессивной формы QD-алгоритма<sup>1)</sup>



<sup>1)</sup> Здесь и в дальнейшем значок  $\Rightarrow$  означает, что стоящая справа величина вычисляется по написанной слева от знака формуле;  $1 \Rightarrow v$  означает, что индексу  $v$  придается значение 1.

Теперь нетрудно доказать, что непрерывная дробь

$$\frac{1}{z} - \frac{q_1}{1} - \frac{e_1}{z} - \frac{q_2}{1} - \dots$$

представляет функцию  $f(z)$  и сравнение с (2) показывает, что  $q_k, e_k$  являются искомыми величинами  $q_k^{(v)}, e_k^{(v)}$ .

ПРИМЕР. Определить полюсы функции

$$\frac{z^2 + 3z + 1}{z^3 - 9z^2 - 8z + 2}.$$

Отправляемся от  $N_0^* = z^3 - 9z^2 - 8z + 2$  и  $N_1 = z^2 + 3z + 1$ , применим формулы (5), проводя все выкладки с шестью значащими цифрами:

$$\begin{aligned} q_1 N_1^* &= 12z^2 + 9z - 2, & \text{т. е. } q_1 &= 12, & N_1^* &= z^2 + 0,75z - \\ &&&&&- 0,166667, \\ e_1 N_2 &= -2,25z - 1,166667, & \text{т. е. } e_1 &= -2,25, & N_2 &= z + 0,518519, \\ q_2 N_2^* &= -0,231481z + 0,166667, & \text{т. е. } q_2 &= -0,231481, & N_2^* &= z - 0,720003, \\ e_2 N_3 &= -1,23852, & \text{т. е. } e_2 &= -1,23852, & N_3 &= 1, \\ q_3 N_3^* &= 0,720003, & \text{т. е. } q_3 &= 0,720003, & N_3^* &= 1. \end{aligned}$$

По формулам (4) теперь можно построить QD-схему:

$q_1^{(v)}$	$e_1^{(v)}$	$q_2^{(v)}$	$e_2^{(v)}$	$q_3^{(v)}$	$e_3^{(v)}$
12					
	-2,25				
9,75		-0,231481			
	0,0534187		-1,23852		
9,80342		-1,52342		0,720003	
	-0,0083011		0,585353		0
9,79512		-0,929766		0,134650	
	0,0007880		-0,0847716		0
9,79591		-1,01533		0,219422	
	-0,0000816		0,0183199		0
9,79583		-0,996928		0,201102	
.	+0,0000083		-0,0036955		0
.	.	-1,00063		0,204798	
.	.	.	0,0007563		0
.	.	.	.	0,204012	
.	.	.	.	.	0

(величины  $s_v$  в вычислениях нигде не используются и поэтому здесь опущены).

Пример показывает, что неустойчивости здесь уже нет. Столбцы  $q_1^{(v)}, q_2^{(v)}, q_3^{(v)}$  явно сходятся к искомым полюсам:

$$\lambda_1 = 5 + \sqrt{23} \approx 9,79583; \quad \lambda_2 = -1;$$

$$\lambda_3 = 5 - \sqrt{23} \approx 0,204168.$$

Если многочлен  $N(z)$  имеет комплексные сопряженные корни или корни с равными абсолютными значениями, то столбцы QD-схемы сходятся, конечно, не будут (см. § 7).

## § 6. Формулы Вронского

Развитый в предыдущем параграфе метод вычисления корней многочлена обладает тем недостатком, что предварительно необходимо провести разложение в непрерывную дробь для заполнения первой строки QD-схемы.

Айткен еще в работе [11]<sup>1)</sup> показал, что для определителей Ганкеля  $H_\sigma^{(v)}$  [см. гл. I, формулы (11)] можно построить прогрессивный (т. е. развертываемый по  $v$ ) вычислительный процесс, причем первая строка при этом очень просто получается из коэффициентов многочлена. Можно предположить, что в силу имеющейся связи [гл. I, формулы (12)] между QD-алгоритмом и определителями Ганкеля аналогичное упрощение возможно и для QD-алгоритма.

Такое упрощение действительно существует и основывается на формуле Вронского<sup>2)</sup>

$$\frac{1}{\sum_{v=0}^{\infty} s_v z^v} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{\binom{k+1}{2}}}{s_0^{k+1}} \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & s_0 & s_1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & & & \cdot & \cdot \\ 0 & s_0 & s_1 & \dots & & s_{k-3} & s_{k-2} \\ s_0 & s_1 & s_2 & \dots & & s_{k-2} & s_{k-1} \\ s_1 & s_2 & s_3 & \dots & & s_{k-1} & s_{k-2} \end{vmatrix} z^k. \quad (6)$$

Используя связь между определителями Ганкеля, входящими в формулу (6), и QD-схемой, построенной на  $s_v$ , можно показать, что величины  $q$  и  $e$  зигзагообразного

<sup>1)</sup> На эту работу мне любезно указал А. Хаусхольдер.

<sup>2)</sup> См. [14], стр. 121. Я благодарен Ф. Л. Баэру за ссылку на эту работу, а также за указание на связь с § 4 его работы [22].

ряда QD-схемы, построенной на коэффициентах функции  $z^{n-1}/N(z)$ , непосредственно выражаются через коэффициенты многочлена  $N(z)$ .

Пусть  $N(z) = \sum_{k=0}^n c_k z^k$ . Тогда<sup>1)</sup>

$$\left. \begin{aligned} q_k^{(1-k)} &= \left\{ \begin{array}{ll} -c_{n-1}/c_n & (k=1), \\ 0 & (k=2, 3, \dots, n), \end{array} \right. \\ e_k^{(1-k)} &= \frac{c_{n-k-1}}{c_{n-k}} \quad (k=1, 2, \dots, n-1). \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Таким образом, можно начать QD-схему для коэффициентов функции  $z^{n-1}/N(z)$  с горизонтальных рядов

$$\begin{array}{ccccccc} -\frac{c_{n-1}}{c_n} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{c_{n-2}}{c_{n-1}} & \frac{c_{n-3}}{c_{n-2}} & \dots & \dots & \frac{c_0}{c_1} & & \end{array}$$

и продолжать ее вниз с помощью правил ромба из § 3 гл. I. Мы проиллюстрируем этот способ нахождения нулей опять на многочлене  $z^3 - 9z^2 - 8z + 2$  из § 5 [подчеркнуты начальные значения, вычисленные по формулам (7)].

9		0		0		
9,888889	0,888889		-0,25			
9,786517	-0,102372	-1,138889	0,054878	0,25		
9,796785	0,010268	-0,981639		0,195122		
9,795734	-0,001051	-1,002815	-0,010908	0,206030		
9,795841	0,000107	-0,999523	0,002241	0,203789		
9,795830	-0,000011	-1,000087	-0,000457	0,204246		
9,795831	0,000001	-0,999983	0,000093	0,204153		
		-1,000003	-0,000019	0,204172		

<sup>1)</sup> Доказательство этой формулы см. в работе [12]. Там, правда, строится QD-схема для функции  $1/N(z)$ , однако это отражается только на нумерации величин по индексу  $v$ .

### § 7. Нахождение комплексных корней

Если уравнение, которое мы решаем, имеет сопряженные комплексные корни, то некоторые величины  $q$  будут колебаться. Точнее, если

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_{k-1}| = |\lambda_k| > |\lambda_{k+1}| > \dots ,$$

то величины  $q_\sigma^{(v)}$ ,  $\sigma \neq k-1, k$  сходятся, как и прежде, к корням уравнения, а частные  $q_{k-1}^{(v)}$  и  $q_k^{(v)}$  колеблются, причем величина  $e_{k-1}^{(v)}$  не стремится при  $v \rightarrow \infty$  к нулю. Тем не менее теоремы 6 гл. I, в частности следствие 2, дают нам способ для вычисления комплексных корней  $\lambda_{k-1}$  и  $\lambda_k$  (там надо положить  $m = k-2$  и  $n = k$ ):

Надо образовать многочлен

$$p_k^{(v)}(z) = z^2 - [q_{k-1}^{(v+1)} + q_k^{(v)}]z + q_k^{(v)}q_{k-1}^{(v)}, \quad (8)$$

который при  $v \rightarrow \infty$  стремится к  $(z - \lambda_{k-1})(z - \lambda_k)$ .

Другими словами, при сделанных предположениях существуют пределы

$$\left. \begin{aligned} \lim_{v \rightarrow \infty} (q_{k-1}^{(v+1)} + q_k^{(v)}) &= \lambda_{k-1} + \lambda_k, \\ \lim_{v \rightarrow \infty} q_{k-1}^{(v)} \cdot q_k^{(v)} &= \lambda_{k-1} \cdot \lambda_k, \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

что позволяет найти корни  $\lambda_{k-1}$  и  $\lambda_k$  решением квадратного уравнения. Формулы (9) могут принести пользу также в том случае, когда корни  $\lambda_{k-1}$  и  $\lambda_k$  почти равны по абсолютной величине, вследствие чего плохо сходятся столбцы  $q_{k-1}^{(v)}$  и  $q_k^{(v)}$ .

ПРИМЕР. Решение уравнения  $z^4 - 4z^3 + 5z^2 - 4z + 1 = 0$  с помощью отыскания полюсов функции  $z^3/(z^4 - 4z^3 + 5z^2 - 4z + 1)$ .

Согласно § 6, заполнение QD-схемы для этой функции можно начать с горизонтального ряда (соответствующие величины в табл. на стр. 44 подчеркнуты). Следует обратить внимание на то, что соответствующие одному и тому же значению индекса  $v$  величины  $q$  и  $e$  расположены, как и прежде, в наклонной строке (см. табл.). Так как последовательности  $q_2^{(v)}$  и  $q_3^{(v)}$ , по-видимому, не сходятся, образуем многочлены  $p_k^{(v)}$  ( $k = 3$ ):

$q_1$	$e_1$	$q_2$	$e_2$	$q_3$	$e_3$	$q_4$
4	-1,25	0	-0,8	0	-0,25	0
2,75	-0,204545	0,45	-0,977778	0,55	-0,113636	0,25
2,545455	-0,323232	4,277778	1,414141	-0,029221	0,363636	
2,571429	3,928572	-3,150000	-2,892858	0,003968	0,392857	
2,611111	0,738890	-1,113156	0,261110	0,005910	0,388889	
2,622340	-0,385495	3,985399	1,380176	0,001640	0,382979	
		3,601555	-2,603583	0	0,381339	
						$\lambda_4$
						$\lambda_1$

комплексная пара корней?

$$\begin{aligned}\hat{p}_3^{(0)} &= z^2 - 1,09091z + 0,636364, \\ \hat{p}_3^{(1)} &= z^2 - 1,03571z + 0,935065, \\ \hat{p}_3^{(2)} &= z^2 - z + 1,02579, \\ \hat{p}_3^{(3)} &= z^2 - 0,99468z + 1,01980, \\ \hat{p}_3^{(4)} &= z^2 - 0,99797z + 1,00367,\end{aligned}$$

.....

Многочлены  $p_3^{(v)}$  при  $v \rightarrow \infty$ , очевидно, стремятся к  $z^2 - z + 1$ , который является в действительности делителем многочлена  $z^4 - 4z^3 + 5z^2 - 4z + 1$ . Соответствующие корни равны  $\lambda_{2,3} = (1 \pm i\sqrt{3})/2$ .

### § 8. Квадратичная сходимость QD-алгоритма

Введенную в § 4 прогрессивную форму QD-алгоритма можно рассматривать как способ построения непрерывных дробей типа  $S$  для функций

$$f_v(z) = \sum_0^\infty \frac{s_{v+k}}{z^{k+1}} \quad (v = 1, 2, 3, \dots)$$

(функции  $f_v(z)$  определены в § 5 гл. I) по непрерывной дроби типа  $S$  для функции  $f_0(z) = f(z)$ . Нам выгодно будет здесь рассматривать одновременно и непрерывные дроби типа  $J$  для этих функций, причем непрерывные дроби типа  $S$  или  $J$  функции  $f_v(z)$  мы будем для простоты обозначать через  $S_v$  или  $J_v$  соответственно. Мы попробуем здесь существенно ускорить сходимость QD-алгоритма.

Формулы (4), по которым проводится QD-алгоритм, можно разбить на две группы:

$$\left. \begin{array}{l} \alpha_\sigma^{(v+1)} = q_\sigma^{(v)} + e_\sigma^{(v)}, \\ \beta_\sigma^{(v+1)} = q_{\sigma+1}^{(v)} e_\sigma^{(v)}, \end{array} \right\} \sigma = 1, 2, \dots, n; e_n^{(v)} = 0; \quad (10)$$

$$\left. \begin{array}{l} q_\sigma^{(v+1)} = \alpha_\sigma^{(v+1)} - e_{\sigma-1}^{(v+1)}, \\ e_\sigma^{(v+1)} = \frac{\beta_\sigma^{(v+1)}}{q_\sigma^{(v+1)}}, \end{array} \right\} \sigma = 1, 2, \dots, n; e_0^{(v+1)} = \beta_n^{(v+1)} = 0. \quad (11)$$

Выкладки § 5 гл. I, и в особенности формулы (9a) гл. I, говорят о том, что введенные здесь величины  $\alpha_\sigma^{(v+1)}$

и  $\beta_{\sigma}^{(v+1)}$  фактически являются коэффициентами из непрерывной дроби  $J_{v+1}$ , причем они появляются в качестве промежуточных результатов при построении  $S_{v+1}$  по  $S_v$ .

Заметим здесь также, что сдвиг системы координат вызывает тривиальные преобразования в записи функции в виде непрерывной дроби типа  $J$ , сводящиеся к тому, что ко всем константам  $a_{\sigma}$  добавляется величина сдвига; действительно

$$\frac{c}{|z-a_1|} - \frac{\beta_1}{|z-a_2|} - \dots = \frac{c}{|z^*-a_1^*|} - \frac{\beta_1}{|z^*-a_2^*|} - \frac{\beta_2}{|z^*-a_3^*|} - \dots,$$

где  $z = z^* + t$ ,  $a_{\sigma} = a_{\sigma}^* + t$ .

При вычислении полюсов функции  $f(z)$  целесообразно непосредственно после вычисления  $a_{\sigma}^{(v+1)}$  и  $\beta_{\sigma}^{(v+1)}$  в качестве промежуточного шага произвести такой сдвиг  $z$ -плоскости, чтобы начало координат приблизилось к какому-либо полюсу  $f(z)$  (далее мы будем этот полюс обозначать через  $\lambda_n$ ). При соответствующих условиях абсолютная величина этого полюса в новой системе координат будет существенно меньше абсолютных величин других полюсов. Поэтому, как следует из рассуждений при доказательстве теоремы 5 гл. I, величины  $e_{n-1}^{(v)}$  при выполнении дальнейших вычислений будут стремиться к нулю значительно быстрее. В результате мы получим лучшее приближение для  $\lambda_n$ , которое опять можно будет использовать для сдвига координатной системы, чтобы еще больше ускорить сходимость.

Выполняя на каждом шаге изложенного ранее метода такой сдвиг координатной системы и выбирая  $q_n^{(v)}$  в качестве приближенного значения  $\lambda_n$  в соответствующей системе, мы получаем следующий метод вычисления корней многочлена  $N(z)$  (величины  $a_{\sigma}^{(v+1)}$  и  $\beta_{\sigma}^{(v+1)}$  снова во всех формулах исключены):

1. а) берется, как и в § 5, рациональная функция  $N_1(z)/N(z)$  и разлагается в непрерывную дробь типа  $S$ ; коэффициенты этой дроби служат начальными значениями для величин  $q$  и  $e$  ( $q_{\sigma}^{(0)}$  и  $e_{\sigma}^{(0)}$ ); либо

б) образуется, как и в § 6, горизонтальный ряд QD-схемы для функции  $z^{n-1}/N(z)$  и схема продолжается вниз, пока не будет получена косая строка с величинами  $q_{\sigma}^{(0)}$ ,  $e_{\sigma}^{(0)}$ .

2. Отправляясь от  $t_0 = 0$  и величин  $q_{\sigma}^{(0)}$  и  $e_{\sigma}^{(0)}$ , вычисленных в соответствии либо с 1 а), либо с 1 б), определяем последовательно для  $v = 0, 1, 2, \dots$

$$\left. \begin{aligned} t_{v+1} &= t_v + q_n^{(v)}, \\ q_{\sigma}^{(v+1)} &= q_{\sigma}^{(v)} + e_{\sigma}^{(v)} - e_{\sigma-1}^{(v)+1} - q_n^{(v)}, \\ \frac{e_{\sigma}^{(v+1)}}{q_{\sigma}^{(v+1)}} &= \frac{q_{\sigma+1}^{(v)} e_{\sigma}^{(v)}}{q_{\sigma}^{(v+1)}}. \end{aligned} \right\} \begin{aligned} \sigma &= 1, 2, \dots, n, \\ e_0^{(n+1)} &= e_n^{(v)} = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

В этом вычислительном процессе величина  $e_{\sigma}^{(v)}$  стремится к нулю, а  $t_v + q_{\sigma}^{(v)}$  стремится к соответствующему корню многочлена  $N(z)$ , причем сходимость у  $e_{n-1}^{(v)}$  и  $t_v + q_n^{(v)}$  соответственно к 0 и  $\lambda_n$  квадратичная.

Как только  $e_{n-1}^{(v)}$  сделается достаточно малым,  $q_n^{(v)}$  и  $e_{n-1}^{(v)}$  можно отбросить и продолжать процесс, заменив в нем  $n$  на  $n-1$ . Таким способом получают квадратичную сходимость к корню  $\lambda_{n-1}$  и т. д. Практика показывает, что вычисление  $\lambda_n$  продолжается сравнительно долго, после чего быстро, один за другим, получаются остальные  $\lambda_{\sigma}$ .

В качестве примера вычислим корни многочлена

$$z^4 - 4z^3 + 5z^2 - 4z + 1.$$

$q_1$	$q_2$	$q_3$	$q_4$
4.000000	0	0	0
-1.26		-0.8	-0.25
2.357143	0.45	0.55	0.25
-0.238636		-0.977778	-0.113636
2.129594	-0.681999	1.414141	0.363636
0.076423		2.027446	-0.029221
2.105821	1.280111	-1.036383	0.392857
0.044361		-1.639845	0.011087
-0.404281		0.626636	-0.011087
		2.541762	-0.000196
		-1.915518	0.000196
		0.000000	0.381966

Приводимая выше таблица содержит числа, вычисленные по правилу 1б) (выше пунктирной линии) и по формулам (12) (ниже пунктирной линии).

К этому моменту минимальный корень  $\lambda_4 = 0,381966$  уже вычислен. Можно было бы теперь отбросить последние  $q$ -столбец и  $e$ -столбец и, применяя тот же способ для отыскания других нулей, продолжать вычисления с оставшимися столбцами. Однако следующие наименьшие корни являются комплексно сопряженными, так что для получения сходящегося процесса потребовалось бы выполнять комплексные сдвиги. Необходимое для этой цели приближенное значение комплексного корня (в сдвинутой системе координат) легко получить из величин  $q_2, e_2, q_3$  последней наклонной строки QD-схемы: образуем уравнение

$$x^2 - 0,221962x + 0,774408 = 0$$

и получаем

$$x = 0,110981 \pm 0,872978i.$$

Однако проводить вычисления с комплексными числами очень неудобно и для действительных многочленов этот неприятный момент можно обойти: если вслед за комплексным сдвигом на  $a+ib$  на следующем QD-шаге сделать сдвиг на  $-2ib$ , а затем снова на  $+ib$ , то в QD-схеме после двух комплексных строк опять образуется строка, состоящая исключительно из действительных чисел. Этот факт легко доказать. Используя его, мы получаем, наконец, следующий

Способ для вычисления комплексных корней с квадратичной сходимостью. Пусть наклонная строка с номером  $v$ , состоящая из величин  $q_\sigma^{(v)}, e_\sigma^{(v)}$  и соответствующего начала координат  $t$ , уже вычислена (для  $v=0$ , например, по правилам 1а) или 1б)).

2. а) если три последних числа  $q_{n-1}^{(v)}, e_{n-1}^{(v)}, q_n^{(v)}$  говорят о том, что корень  $\lambda_n$  действительный, т. е. если квадратное уравнение

$$x^2 - (q_{n-1}^{(v)} + e_{n-1}^{(v)} + q_n^{(v)})x + q_{n-1}^{(v)}q_n^{(v)} = 0 \quad (13)$$

<sup>1)</sup> Это основано, по существу, на формулах (9); при сделанных там предположениях  $q_{k-1}^{(v)} + e_{k-1}^{(v)} + q_k^{(v)}$  стремится к  $\lambda_k + \lambda_{k-1}$ .

имеет действительные корни, то вычисления можно проводить по формулам (12);

б) если же уравнение (13) имеет два комплексно сопряженных корня  $\lambda \pm i\mu$ , то вычисляются:

для  $\sigma = 1$

$$\left. \begin{aligned} q_1^{(v)} + e_1^{(v)} - \lambda &\Rightarrow q_1^*, \\ \left( \frac{\mu}{q_1^*} \right)^2 &\Rightarrow p_1, \\ \frac{e_1^{(v)} q_2^{(v)}}{q_1^*(1+p_1)} &\Rightarrow e_1^*, \\ q_1^* + e_1^* &\Rightarrow q_1^{**}; \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

для  $\sigma = 2, 3, \dots, n^1)$

$$\left. \begin{aligned} q_\sigma^{(v)} + e_\sigma^{(v)} - e_{\sigma-1}^* - \lambda &\Rightarrow q_\sigma^*, \\ \frac{e_{\sigma-1}^* q_\sigma^*}{q_{\sigma-1}^{**}} &\Rightarrow e_{\sigma-1}^{**}, \\ p_{\sigma-1} \left( \frac{q_{\sigma-1}^{**}}{q_\sigma^*} \right)^2 &\Rightarrow p_\sigma, \\ q_{\sigma-1}^{**} + e_{\sigma-1}^{**} - e_{\sigma-2}^{(v+3)} &\Rightarrow q_{\sigma-1}^{(v+3)}, \\ \frac{q_\sigma^{(v)} e_\sigma^{(v)}}{q_\sigma^*(1+p_\sigma)} &\Rightarrow e_\sigma^*, \\ q_\sigma^* + e_\sigma^* - e_{\sigma-1}^{**} &\Rightarrow q_\sigma^{**}, \\ \frac{e_{\sigma-1}^{**} q_\sigma^{**}}{q_{\sigma-1}^{(v+3)}} (1+p_\sigma) &\Rightarrow e_{\sigma-1}^{(v+3)}; \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

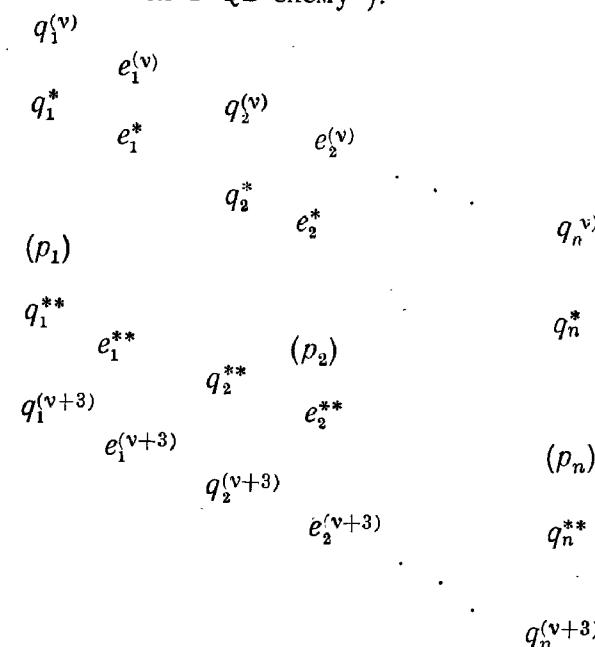
для  $\sigma = n$

$$\left. \begin{aligned} q_n^{**} - e_{n-1}^{(v+3)} &\Rightarrow q_n^{(v+3)}, \\ t_v + \lambda &\Rightarrow t_{v+3}. \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Сосчитанные по этим формулам величины следующим

<sup>1)</sup> Встречающиеся здесь величины  $e_0$  и  $e_n$  следует всегда полагать равными нулю.

образом включаются в QD-схему<sup>1)</sup>:



Теперь можно таким же образом проводить вычисления, отправляясь от наклонной строки с номером  $v + 3$ , и так до тех пор, пока  $e_{n-2}^{(v)}$  не обратится в нуль, показав тем самым, что уже выделена пара комплексных корней. Последние можно определить через величины  $q_{n-1}^{(v)}$ ,  $e_{n-1}^{(v)}$  и  $q_n^{(v)}$  с помощью уравнения (13), а именно корни равны

$$t_v \pm i\sqrt{q_{n-1}^{(v)}q_n^{(v)}}. \quad (17)$$

После этого можно отбросить последние  $e$ - и  $q$ -столбцы и, уменьшив  $n$  на 2, продолжать дальше. Определяемый формулами (13) – (16) специальный способ расчета комплексных пар корней уравнения с действительными коэффициентами означает внесение лишь следующих изменений в нормальный QD-алгоритм со сдвигом координатной системы: а) вводятся вспомогательные величины  $p_1, p_2, \dots, p_n, b$ , б) появляется множитель  $(1 + p_\sigma)$  при вычислении  $e_\sigma^*$  и  $e_{\sigma-1}^{(v+3)}$ ,

1) Здесь уместно обратить внимание на то, что буквы с одной звездочкой являются действительными частями величин  $q$  и  $e$ , которые получились бы при комплексном сдвиге.

с) изменяется последовательность, в которой вычисляются элементы QD-схемы.

В остальном сохраняются правила ромба. Выполняемая при этом дополнительная работа существенно меньше того труда, который пришлось бы затратить на вычисления с комплексными числами по обычным формулам.

В качестве численного примера рассмотрим опять многочлен  $z^4 - 4z^3 + 5z^2 - 4z + 1$  и сосчитаем остальные его корни по новому методу. В качестве отправного пункта возьмем последнюю наклонную строку начатой на стр. 47 QD-схемы.

$\nu = 3$	$t_1$	$e_1$	$q_2$	$e_2$	$q_3$	$t_3$
	2,205821	0,044351	-0,404281			
*	$\#_0 (13): x^2 - 0,221962x + 0,774408 = 0;$					
	2,139172		2,541762		-1,915518	0,381966
**	(0,186847)	-0,007186				
	2,131987		2,033666			
*			$x \sim 0,111, \quad \mu \sim 0,873$			
$\nu = 6$		-0,006853	(0,183040)	-2,023681		
	2,125134		0,016838		-0,002837	
			-0,000064		0,340966 (6,447751)	
*	$\#_0 (13): x^2 - 0,014065x + 0,750027 = 0;$		0,357868		-0,348803	
	2,118038					
**	(0,167179)	-0,000009				
	2,118029		-2,088777			
*			$x \sim 0,007032, \quad \mu \sim 0,866012$			
$\nu = 9$		0,000009	(0,171894)	2,088796		
	2,118033		0,000010		-0,000009	
			0,000000		-1,879916 (0,212215)	
					-1,879906	1,879907
						2,278863
						-0,398956 0,499998

Таким образом, оба корня  $\lambda_2$  и  $\lambda_3$  выделены, и мы находим по формуле (17):  $\lambda_{2,3} = 0,499998 \pm 0,866025i$  и, наконец,  $\lambda_1 = 2,618036$ .

Численные примеры показали, что на точность расчетов влияет *относительная ошибка величин*  $p$ ; поэтому  $p$  следует вычислять с заданным числом верных значащих цифр.

### § 9. Меры при делении на нуль

В QD-алгоритме, так же как и в других вычислительных процессах, ошибки округления приводят к ошибке в окончательном результате. Будучи нелинейным процессом, QD-алгоритм особенно чувствителен к ошибкам округления. Правда, для прогрессивной формы дело обстоит существенно лучше. Здесь ошибки округления влияют на окончательный результат примерно так же, как и во многих других часто используемых вычислительных методах.

Однако в QD-алгоритме иногда приходится делить на нуль или на очень маленькое число. Так, при проведении выкладок в соответствии с § 6 этот случай встретится при обращении в нуль одного из коэффициентов многочлена  $N(z)$ , например при решении уравнения  $x^4 + x^2 + x - 1 = 0$ . Впрочем, деление на нуль или на очень маленькое число может встретиться и через несколько QD-шагов, если обратится в нуль или станет очень малым какой-либо  $q_\sigma^{(v)}$ ,  $\sigma < n$  (обращение в нуль  $q_n^{(v)}$  вреда не приносит).

ПРИМЕР. Решение уравнения  $8x^4 - 24x^3 + 25x^2 - 26x - 13 = 0$ . (Вычисления с шестью знаками после запятой.)

3,000000	0	0	0	0
-1,041667	0	-1,04	0	0
1,958333	0,001667	1,54	0,5	-0,5
-0,000887	-960,767846	962,145508	-0,162338	-0,337662
1,957446	-960,765292	962,148066	0,000057	-0,337719
0,435362	0,947412	-0,002501	0,007697	-0,337719
2,392808	0,172378	-2,539901	2,545097	-3,662766
-1,764867	-1,118714	3,662766	-0,001045	0,947556
			-0,344371	-0,000322
			-0,344049	-0,344049

Видно, что подчеркнутая величина  $q$  вызывает резкий рост других чисел, которые затем снова быстро уменьшаются; после этого сохраняется значительная ошибка округления. Имеется все же возможность провести QD-схему через опасные места без потери точности. Для этого надо обозначить буквой  $M$  возникающее в столбце  $e_2$  большое число — 960,767846 и в последующих вычислениях обращаться с ним как с переменным. Положительные степени  $M$  в дальнейшем сократятся, и вычисления можно будет продолжать обычным способом. Если вычисления проводятся с плавающей запятой (т. е. с заданным количеством значащих цифр), то этот обходный маневр можно сформулировать таким образом:

Способ устранения больших ошибок при малых  $q$ . Если  $q_k^{(v)} (k < n)$  мало и вследствие этого появляется большое число  $e_k^{(v)}$ , то следует нормально продолжать счет и лишь величины  $q_k^{(v+2)}$  и  $q_{k+1}^{(v+1)}$  получать по другим формулам, а именно сначала вычислять

$$\left. \begin{aligned} r = q_{k+1}^{(v-1)} + e_{k+1}^{(v-1)}, \quad s = q_k^{(v)} - e_{k-1}^{(v+1)}, \quad t = s \cdot \frac{q_{k+1}^{(v)}}{q_k^{(v+1)}}, \\ \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

а затем

$$q_k^{(v+2)} = r + s - t - e_{k-1}^{(v+2)}, \quad q_{k+1}^{(v+1)} = t + e_{k+1}^{(v)}.$$

Для приведенного выше примера, проводя вычисления с шестью, а для чисел, больших единицы, с семью значащими цифрами, мы получим (подчеркнуты величины, соответствующие значению индекса  $v = 0$ )

$q_1$	$e_1$	$q_2$	$e_2$	$q_3$	$e_3$	$q_4$
3,000000		0		0		0
-1,041667		0	-1,04		0,5	
1,958333	0,001667	1,54	0,5	-0,5		
-0,000887	-960,767846	962,145508	-0,162338	-0,337662		
1,957446	-960,765292	962,148066	0,000057	-0,337719		
0,435362	0,947412	-0,002501	0,007697	-0,337719		
2,392808	0,172378	-2,539901	2,545097	-3,662766		
-1,764867	-1,118714	3,662766	-0,001045	0,947556		
			-0,344371	-0,000322		
			-0,344049	-0,344049		

Здесь надо вычислить вспомогательные величины  $r$ ,  $s$ ,  $t$ :

$r = 1,377662$      $s = 0,00255370$      $t = -0,00255737$

Теперь продолжаем дальше:

0,435217	962,1481	0,0000579720	-0,337719
2,392663	0,947556	-0,00250040	
0,172357	-2,538904	0,007695	
2,565020	-1,763705	2,544099	-0,345414
	.	.	.

### § 10. Интерполяция экспоненциальными суммами

При интерполяции функции, заданной для  $n$  значений аргумента (опорные точки), обычно проводят через заданные точки многочлен степени  $n - 1$ . Однако во многих случаях многочлен принципиально не годится для интерполяции; так обстоит дело, например, если функция при  $t \rightarrow \infty$  стремится к конечному значению или изменяется приблизительно периодически. В подобных случаях, как правило, лучше приближать функцию суммами экспонент

$$P(t) = \sum_{k=1}^n a_k e^{a_k t} \quad (19)$$

(конечная сумма Дирихле).

Эта сумма зависит от  $2n$  параметров  $a_k$  и  $a_k$ , так что может быть задано  $2n$  точек. Другими словами, можно потребовать, чтобы сумма (19) совпадала с данной функцией в  $2n$  точках  $t_0, t_1, \dots, t_{2n-1}$ . Правда, задача определения коэффициентов  $a$  и  $a$  является нелинейной и она существенно сложнее обычной интерполяции Ньютона.

Если, однако, опорные точки заданы с равным шагом:  $t_v = t_0 + vh$ ,  $v = 0, 1, 2, \dots, 2n-1$ , то эта задача легко решается с помощью QD-алгоритма. Заданные значения  $F(t_v)$  функции  $F(t)$  обозначим через  $s_v$ . Наша задача по существу совпадает тогда с задачей о представлении в виде суммы простейших дробей некоторой рациональной функции  $f(z)$ , знаменатель которой имеет степень  $n$ , а разложение в окрестности точки  $z = \infty$  начинается с членов

$$\frac{s_0}{z} + \frac{s_1}{z^2} + \frac{s_2}{z^3} + \dots + \frac{s_{2n-1}}{z^{2n}}.$$

Действительно, пусть

$$F(t_v) = s_v = \sum_{k=1}^n a_k e^{\frac{a_k}{h}(t_0+vh)},$$

тогда

$$f(z) = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{s_v}{z^{v+1}} = \sum_{v=0}^{\infty} \sum_{k=1}^n \frac{a_k e^{\frac{a_k}{h}(t_0+vh)}}{z^{v+1}} = \sum_{k=1}^n \frac{a_k e^{\frac{a_k}{h}t_0}}{z - e^{\frac{a_k}{h}h}} = \sum_{k=1}^n \frac{c_k}{z - \lambda_k} \quad (20)$$

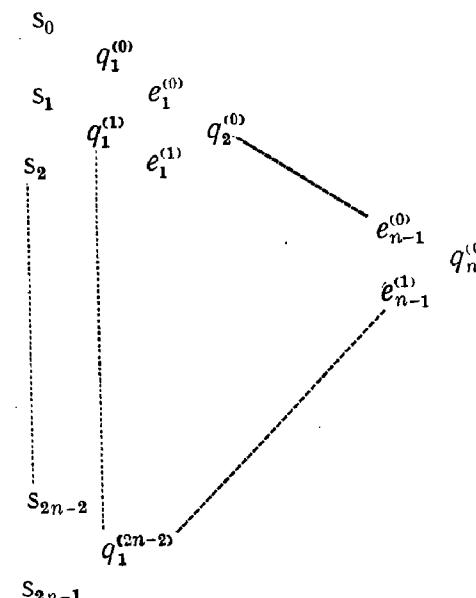
(и обратно). Здесь  $\lambda_k = e^{\frac{a_k}{h}h}$ ,  $c_k = a_k e^{\frac{a_k}{h}t_0}$ .

Отсюда видно, что могут быть указаны случаи, когда через  $2n$  заданных точек не проходит ни одна из функций вида (19), потому что функция  $f(z)$  имеет кратные полюсы. Тогда надо было бы привлекать также члены вида  $t^\sigma e^{\alpha_k t}$ . Мы, однако, на этом подробно останавливаться не будем.

Перед нами стоит теперь задача найти разложение на простейшие дроби для рациональной функции

$$f(z) = \frac{s_0}{z} + \frac{s_1}{z^2} + \frac{s_2}{z^3} + \dots,$$

степень знаменателя которой равна  $n$ , если заданы  $2n$  первых коэффициентов ряда  $s_0, s_1, s_2, \dots, s_{2n-1}$ . Заметим, что функция  $f(z)$  однозначно определяется этими коэффициентами. Действительно, величинами  $s_0, s_1, \dots, s_{2n-1}$  однозначно определяется треугольник QD-схемы,



верхняя наклонная строка которого содержит все коэффициенты непрерывной дроби типа S для функции  $f(z)$ .

Теперь определяем полюсы функции  $f(z)$ , продолжая эту QD-схему вниз и учитывая, что  $e_n^{(v)} = 0$ . При этом

можно, в частности, применить и метод, описанный ранее в § 8.

Определив полюс  $\lambda_n$  функции  $f(z)$  и применяя в обратном направлении теорему сложения для непрерывных дробей из § 10 гл. I, мы выделим дробь

$$c_n/(z - \lambda_n).$$

Для этого надо сначала преобразовать получаемую из QD-схемы непрерывную дробь типа  $S$  к форме типа  $J$ :

$$f(z) = \frac{s^*}{|z - a_1^*|} - \frac{\beta_1^*}{|z - a_2^*|} - \dots - \frac{\beta_{n-1}^*}{|z - a_n^*|}, \quad (21)$$

затем с помощью величин  $a^*$ ,  $\beta^*$  и  $\lambda = \lambda_n$  по формулам (34) гл. I получить величины  $q^*$  и  $e^*$ , по формулам (32) гл. I — величины  $q$ ,  $e$ ,  $s$ ,  $c$  и, наконец, по формулам (28) гл. I — величины  $a$  и  $\beta$ , являющиеся коэффициентами непрерывной дроби типа  $J$ , стоящей вторым слагаемым в следующей формуле:

$$f(z) = \frac{c_n}{z - \lambda_n} + \frac{s}{|z - a_1|} - \frac{\beta_1}{|z - a_2|} - \dots - \frac{\beta_{n-2}}{|z - a_{n-1}|}. \quad (22)$$

Эту непрерывную дробь обрабатываем аналогичным образом до тех пор, пока не будет получено полное разложение на простейшие дроби.

**Численный пример.** Пусть даны следующие значения функции  $F(t) = 1/t$ :

$t$	$F(t)$	$t$	$F(t)$
1,0	1	1,8	0,5555556
1,2	0,8333333	2,0	0,5
1,4	0,7142857	2,2	0,4545455
1,6	0,625	2,4	0,4166667

По этим числам строим QD-схему<sup>1)</sup>:

0,8333333	0,0238095	0,6428571	0,0555556	0,5444444	0,0818182	0,4848485
0,8571429	0,0178571	0,6805556	0,0444444	0,5818182	0,0681818	
0,875	0,0138889	0,7111111	0,0363636	0,6136364		
0,8888889	0,0111111	0,7363636	0,0303030			
0,9	0,0090909	0,7575758				
0,9090909	0,0075758					
0,9166667						
		0,9627236	0,8128918	0,5789157		0,3121356
		↓	↓	↓		↓

Продолжая эту QD-схему вниз, получаем указанные в ней полюсы функции  $f(z)$ . Непрерывная дробь типа  $J$  выглядит так:

$$\frac{1,0000000}{|z - 0,8333333|} - \frac{0,01984127}{|z - 0,6666667|} - \frac{0,03571429}{|z - 0,6|} - \frac{0,04454545}{|z - 0,5666667|}.$$

1) Величины  $q$  и  $e$  записывались здесь точными дробями и лишь после этого округлялись до семи знаков после запятой. Там, где подобный способ применить невозможно, рекомендуется проводить вычисление величин  $q$  и  $e$  по величинам  $s_v$  с возможно большей точностью. Во всяком случае, следует заметить, что, хотя ошибки округления очень заметно отражаются на значениях коэффициентов  $a_k$  и  $\alpha_k$  [формула (19)], они мало влияют на поведение всей функции  $P(t)$  на интервале  $t_0, t_{2n-1}$ .

Во многих случаях можно существенно повысить точность, образовав сначала обычные разности  $\Delta^v s_0$  ( $v=0, 1, 2, \dots, 2n-1$ ), а затем построив на них QD-схему. На основании равенства

$$\sum_0^\infty \frac{s_v}{z^{v+1}} = \sum_0^\infty \frac{\Delta^v s_0}{(z-1)^{v+1}}$$

в этой схеме получаются величины ' $q$ ' и ' $e$ ', которые позволяют записать непрерывную дробь

$$f(z) = \frac{s_0}{|z-1|} - \frac{|'q_1|}{|1|} - \frac{|'e_1|}{|z-1|} - \frac{|'q_2|}{|1|} - \dots - \frac{|'e_{n-1}|}{|z-1|} - \frac{|'q_n|}{|1|},$$

а из нее уже непосредственно получается непрерывная дробь (21) типа  $J$ .

Отщепляем теперь слагаемое  $c_4/(z - 0,3121356)$ . Применяя формулы (34) и (32) гл. I с  $\lambda = 0,3121356$  и располагая вычисленные величины в соответствии со схемой (33) гл. I, мы получаем таблицу

<u>0,0125819</u>	
0,9874181	
1,0000000	0,5278389
0,5211977	0,0314274
0,0380686	0,3833363
0,3164624	0,0459809
0,1128548	0,4295411
0,1750096	
	0,2545315

Следовательно, согласно формулам (28) гл. I,

$$f(z) = \frac{0,0125819}{z - 0,3121356} + \\ + \frac{0,9874181}{|z - 0,8399745|} - \frac{0,01658860}{|z - 0,7268993|} - \frac{0,01762615}{|z - 0,7876576|}.$$

Отщепляя дальнейшие слагаемые, мы придем, наконец, к разложению на простейшие дроби:

$$f(z) = \frac{0,0125819}{z - 0,3121356} + \frac{0,1458469}{z - 0,5789157} + \frac{0,4353392}{z - 0,8128918} + \frac{0,4062320}{z - 0,9627236}.$$

Чтобы получить теперь представление (19) в виде экспоненциальной суммы, мы воспользуемся соотношениями

$$\lambda_k = e^{h\alpha_k}, \quad c_k = a_k e^{t_0 \alpha_k}$$

(в нашем случае  $h = 0,2$ ;  $t_0 = 1$ ); окончательно

$$P(t) \sim 0,491209 e^{-0,189944 t} + 1,226491 e^{-1,035787 t} + \\ + 2,242953 e^{-2,732991 t} + 4,246486 e^{-5,821588 t}.$$

Остается лишь заметить, что весь процесс расщепления непрерывной дроби типа J на простейшие дроби можно представить в виде схемы счета, изображенной на табл. ча стр. 59.

Схема счета для расщепления непрерывной дроби на простейшие

$c_1 = 0,4062320$				
0	$\Delta$	$0,4062320$	$\Delta$	$0,1498318 =$
		$0,4062320$	$\Delta$	$\equiv \lambda_1 - \lambda_2$
$c_2 = 0,4353392$				
0	$\Delta$	$0,8415712$	*	$0,1498322$
		$0,8415712$	$\Delta$	$0,0723250 =$
		$0,3063010$	*	$0,0775072$
		$0,0183013$	$\Delta$	$0,23339760 =$
				$\equiv \lambda_2 - \lambda_3$
$c_3 = 0,1458469$				
0	$\Delta$	$0,9874181$	*	
		$0,5278389$	*	
		$0,0314274$	$\Delta$	$0,0844399 =$
		$0,3833363$	*	$6,2931819$
		$0,0459809$	$\Delta$	$0,02087420$
				$0,26667801 =$
				$\equiv \lambda_3 - \lambda_4$
$q_2 = 0,6428571$				
$e_1 = 0,0238095$				
$1,0000000$				
$q_1 = 0,8333333$				
$e_2 = 0,0555556$				
$e_3 = 0,5444444$				
$e_4 = 0,0818182$				
$q_4 = 0,4848485$				

Исходные данные содержатся в нижней наклонной строке (коэффициенты непрерывной дроби типа  $S$  для  $f(z)$ ) и справа от вертикальной черты (сдвиги координатной системы, являющиеся разностями найденных посредством QD-алгоритма полюсов функции  $f(z)$ ). Схему последовательно заполняют снизу вверх, применяя правила ромба:

$\Delta$  — середина четверки чисел, для которых выполняется правило  $Q$ -ромба с учетом сдвига координатной системы на величину, указанную наискось справа и ниже<sup>1)</sup>;

\* — середина четверки чисел, для которых выполняется правило  $E$ -ромба.

Записав предварительно нули в указанных в схеме местах верхнего наклонного ряда, получают описанным выше способом искомые коэффициенты  $c_k$  в том же (верхнем) ряду.

<sup>1)</sup> Сумма чисел, стоящих в ромбе слева и внизу, больше суммы двух других чисел на величину сдвига координатной системы.

## Глава III

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРОВ МАТРИЦЫ С ПОМОЩЬЮ QD-АЛГОРИТМА

#### § 1. Определение собственных значений

Для нахождения собственных значений матрицы  $A$  (или интегрального оператора) можно указанным в § 1 гл. I способом вычислить какое-то количество констант Шварца и построить затем на них QD-схему. Полученные таким образом величины  $q_1^{(v)}$  и  $q_2^{(v)}$  дадут некоторое представление о положении двух первых собственных значений матрицы, однако соображения § 3 гл. II говорят о том, что таким путем не удается вычислить собственные значения более точно. Здесь рекомендуется применять прогрессивную форму QD-алгоритма (гл. II, § 4), особенно если необходимо вычислить также и дальнейшие собственные значения.

Необходимые для этого исходные величины  $q_\sigma^{(0)}$  и  $e_\sigma^{(0)}$  лучше всего получить с помощью ВО-алгоритма Ланцоша (см. [4], [5], [6]). Вычисления производятся в следующем порядке.

Правило счета  $A$ . Отправляясь от произвольной<sup>1)</sup> пары векторов  $x_1, y_1$ , последовательно вычисляют

$$\left. \begin{aligned} x_{\sigma+1} &= Ax_\sigma - a_\sigma x_\sigma - \beta_{\sigma-1} x_{\sigma-1}, \\ y_{\sigma+1} &= A^* y_\sigma - a_\sigma y_\sigma - \beta_{\sigma-1} y_{\sigma-1}, \\ \beta_0 &= 0, \quad \beta_{\sigma-1} = \frac{(x_\sigma, y_\sigma)}{(x_{\sigma-1}, y_{\sigma-1})}, \quad a_\sigma = \frac{(Ax_\sigma, y_\sigma)}{(x_\sigma, y_\sigma)} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

для  $\sigma = 1, 2, \dots, n^2$ .

<sup>1)</sup> При неудачном выборе векторов  $x_1, y_1$  могут, правда, встретиться случаи, описанные в § 4 работы [6]. Однако здесь и всюду в дальнейшем мы предполагаем, не оговаривая этого, что векторы  $x_1, y_1$  находятся «в общем положении» для ВО-алгоритма.

<sup>2)</sup> Для  $\sigma = n$  (порядок матрицы  $A$ ) по формулам должно получиться  $x_{n+1} = y_{n+1} = 0$ ; этот факт можно использовать для контроля вычислений. Величины  $a_n$  и  $\beta_{n-1}$ , полученные на последнем этапе, необходимы для дальнейших вычислений.

Пока мы можем написать лишь якобиеву форму для матрицы  $A$ , однако, обращая формулы (19) из гл. I, мы получим по  $\alpha_\sigma$ ,  $\beta_\sigma$  искомые величины  $q_\sigma^{(0)}$  и  $e_\sigma^{(0)}$ :

$$\left. \begin{array}{l} q_1^{(0)} = \alpha_1, \\ q_2^{(0)} = \alpha_2 - e_1^{(0)}, \\ \dots \\ q_{n-1}^{(0)} = \alpha_{n-1} - e_{n-2}^{(0)}, \\ q_n^{(0)} = \alpha_n - e_{n-1}^{(0)}, \\ e_1^{(0)} = \frac{\beta_1}{q_1^{(0)}}, \\ e_2^{(0)} = \frac{\beta_2}{q_2^{(0)}}, \\ \dots \\ e_{n-1}^{(0)} = \frac{\beta_{n-1}}{q_{n-1}^{(0)}}. \end{array} \right\} \quad (2)$$

Дальнейшие вычисления проводятся в соответствии с § 4 гл. II.

## § 2. Задача нахождения собственных векторов

Мы будем исходить из того факта, что если начальные векторы  $x_1, y_1$  выбраны соответствующим образом, то построенные с помощью ВО-алгоритма системы векторов  $x_1, x_2, \dots, x_n$  и  $y_1, y_2, \dots, y_n$  являются приблизительно собственными векторами матриц  $A$  и  $A^*$  соответственно (см. [6], стр. 54, теорема 7). Хотя выбираемые там начальные векторы  $x(t) = e^{At/2}x_0$  и  $y(t) = e^{A^*t/2}y_0$  для наших целей не подходят, однако совершенно аналогично можно доказать следующую теорему.

**Теорема 1.** Пусть все собственные значения матрицы  $A$  различны по абсолютной величине и  $x_1^{(2\mu)}, \dots, x_n^{(2\mu)}$ ;  $y_1^{(2\mu)}, \dots, y_n^{(2\mu)}$  — системы векторов, получаемые с помощью ВО-алгоритма из начальных векторов

$$x_1^{(2\mu)} = A^\mu x_1^{(0)}; \quad y_1^{(2\mu)} = (A^*)^\mu y_1^{(0)}; \quad (3)$$

тогда при  $\mu \rightarrow \infty$  векторы  $x_\sigma^{(2\mu)}, y_\sigma^{(2\mu)}$  ( $\sigma = 1, 2, \dots, n$ ) стремятся к собственным векторам матриц  $A$  и  $A^*$  соответственно<sup>1)</sup>.

**Доказательство.** Мы воспользуемся тем очевидным фактом, что ВО-алгоритм Ланцша не зависит от выбора системы координат. Так как при сделанных предположе-

<sup>1)</sup> Эта сходимость относится лишь к направлению векторов.

ниях матрица  $A$  может быть приведена к диагональной форме, мы положим в основу такую систему координат, в которой матрица  $A$  имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix},$$

причем

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|.$$

Тогда

$$\begin{aligned} x_1^{(2\mu)} &= (\alpha_1 \lambda_1^\mu, \alpha_2 \lambda_2^\mu, \dots, \alpha_n \lambda_n^\mu), \\ y_1^{(2\mu)} &= (b_1 \lambda_1^\mu, b_2 \lambda_2^\mu, \dots, b_n \lambda_n^\mu), \end{aligned}$$

а «общее положение» начальных векторов по отношению к  $A$  означает просто, что ни одна из их компонент не равна нулю.

Как известно, между тремя последовательными векторами  $x_{\sigma-1}, x_\sigma, x_{\sigma+1}$  ВО-системы Ланцша существует соотношение

$$x_{\sigma+1}^{(2\mu)} - (A - \alpha_\sigma^{(2\mu)} E) x_\sigma^{(2\mu)} + \beta_{\sigma-1}^{(2\mu)} x_{\sigma-1}^{(2\mu)} = 0$$

( $x_0 = x_{n+1} = 0$ ). Учитывая специальный вид матрицы  $A$ , мы можем записать аналогичные соотношения и для координат  $\xi_{\sigma, p}^{(2\mu)}$  векторов  $x_\sigma^{(2\mu)}$  ( $p$  — номер координаты):

$$\xi_{\sigma+1, p}^{(2\mu)} - (\lambda_p - \alpha_\sigma^{(2\mu)}) \xi_{\sigma, p}^{(2\mu)} - \beta_{\sigma-1}^{(2\mu)} \xi_{\sigma-1, p}^{(2\mu)} = 0, \quad (\sigma, p = 1, 2, \dots, n). \quad (3A)$$

Величины  $\alpha_\sigma^{(2\mu)}$  и  $\beta_\sigma^{(2\mu)}$ , как это следует из § 8 гл. I, связаны с элементами QD-схемы, построенной на константах Шварца  $s_v = (A^v x_1^{(0)}, y_1^{(0)})$ ; именно

$$\begin{aligned} \alpha_\sigma^{(2\mu)} &= q_\sigma^{(2\mu)} + e_{\sigma-1}^{(2\mu)}, \\ \beta_\sigma^{(2\mu)} &= q_\sigma^{(2\mu)} \cdot e_\sigma^{(2\mu)}. \end{aligned}$$

Для больших  $\mu$ , которые нас собственно и интересуют,

мы можем тогда в соответствии с теоремой 5 гл. I написать

$$\alpha_\sigma^{(2\mu)} \sim \lambda_\sigma; \quad \beta_\sigma^{(2\mu)} \sim c_\sigma \left( \frac{\lambda_{\sigma+1}}{\lambda_\sigma} \right)^{2\mu} \rightarrow 0.$$

Учитывая это свойство, а также равенства  $\xi_{0,p} = \xi_{n+1,p} = 0$ ,  $\xi_{1,p} = a_p \lambda_p^\mu$  и соотношение (3A), можно определить координаты  $\xi_{\sigma,p}^{(2\mu)}$  и их асимптотическое поведение при  $\mu \rightarrow \infty$ <sup>1)</sup>

$$\xi_{1,p} = a_p \lambda_p^\mu,$$

$$\xi_{2, p} = (\lambda_p - \alpha_1) \xi_{1, p} \sim \lambda_p^\mu,$$

$$\xi_{3,p} = (\lambda_p - \alpha_2) \xi_{2,p} - \beta_1 \xi_{1,p} \sim \lambda_p^\mu,$$

• • • • • • • • • • • • • • • • •

$$\xi_{p-p} = (\lambda_p - \alpha_{p-1}) \xi_{p-1,p} - \beta_{p-2} \xi_{p-2,p} \sim \lambda_p^\mu.$$

Получить таким же способом  $\xi_{p+1,p}$  уже не удастся, однако остальные координаты могут быть найдены из следующих соотношений:

$$-(\lambda_p - \alpha_n) \xi_{n,p} + \beta_{n-1} \xi_{n-1,p} = 0,$$

следовательно,

$$\frac{\xi_{n,p}}{\xi_{n-1,p}} = \frac{\beta_{n-1}}{\lambda_n - a_n}.$$

Далее,

$$\xi_{n-p} - (\lambda_p - \alpha_{n-1}) \xi_{n-1-p} + \beta_{n-2} \xi_{n-2-p} = 0.$$

следовательно.

$$\frac{\xi_{n-1, p}}{\xi_{n-2, p}} = \frac{\beta_{n-2}}{\lambda_p - a_{n-1} - \frac{\beta_{n-1}}{\lambda_n - a_n}}.$$

В общем случае

$$\frac{\xi_{k+1,p}}{\xi_{k,p}} = \frac{|\beta_k|}{|\lambda_p - \alpha_{k+1}|} - \frac{|\beta_{k+1}|}{|\lambda_p - \alpha_{k+2}|} - \cdots - \frac{|\beta_{n-1}|}{|\lambda_p - \alpha_n|}$$

(k = p, p + 1, ..., n - 1).

<sup>1)</sup> В оставшейся части доказательства мы опускаем всюду верхний индекс 2и.

Используя поведение  $\beta$  при больших  $\mu$ , получаем теперь

$$\xi_{p+1, p} \sim \beta_p \xi_{p, p} \sim \left( \frac{\lambda_{p+1}}{\lambda_p} \right)^{2\mu} \lambda_p^\mu = \left( \frac{\lambda_{p+1}^2}{\lambda_p} \right)^\mu,$$

$$\xi_{p+2, p} \sim \beta_{p+1} \xi_{p+1, p} \sim \left( \frac{\lambda_{p+2}}{\lambda_{p+1}} \right)^{2\mu} \left( \frac{\lambda_{p+1}^2}{\lambda_p} \right)^\mu = \left( \frac{\lambda_{p+2}^2}{\lambda_p} \right)^\mu$$

$$\xi_{n,p} \sim \left( \frac{\lambda_n^2}{\lambda_p} \right)^{\mu}.$$

Таким образом, при больших  $\mu$  компоненты вектора  $x_\sigma^{(2\mu)}$  имеют следующий порядок:

$$\left(\frac{\lambda_2^\sigma}{\lambda_1}\right)^\mu, \left(\frac{\lambda_3^\sigma}{\lambda_2}\right)^\mu, \dots, \left(\frac{\lambda_n^\sigma}{\lambda_{n-1}}\right)^\mu, \lambda_\sigma^\mu, \lambda_{\sigma+1}^\mu, \dots, \lambda_n^\mu, \quad (3B)$$

а сам вектор при  $\mu \rightarrow \infty$ , очевидно, стремится по направлению к  $\sigma$ -му базисному вектору в этой системе координат, т. е. к собственному вектору матрицы  $A$ , принадлежащему собственному значению  $\lambda_\sigma$ . Аналогичное утверждение справедливо и для векторов  $y$ , чем и заканчивается доказательство теоремы.

Однако практическое значение этой теоремы весьма невелико, потому что ВО-алгоритм с начальными векторами (3) неустойчив. Ошибки округления искажают векторы  $x_\sigma^{(2\mu)}, y_\sigma^{(2\mu)}$  тем больше, чем больше номер  $\sigma$ , и приводят в конце концов к тому, что на практике теорема 1 становится «неверной».

Учитывая это, представляется целесообразным проводить ВО-алгоритм не с начальными векторами (3), а с парой векторов  $x_1^{(0)}, y_1^{(0)}$ , в которых «равномерно представлены» все собственные векторы матрицы  $A$ <sup>1)</sup>. Хотя векторы  $x_\sigma^{(0)}, y_\sigma^{(0)}$  ( $\sigma = 1, 2, \dots, n$ ) и образуют тогда биортогональную систему, однако они не приближают собственных векторов матриц  $A$  и  $A^*$ . Но в § 3 мы покажем

1) Пара векторов со случайными координатами в принципе удовлетворяет этому требованию. Однако еще лучше умножить их предварительно на  $A^{-1}$  [соответственно на  $(A^*)^{-1}$ ] с тем, чтобы повысить в них долю собственных векторов, соответствующих малым собственным значениям.

как можно из  $x_{\sigma}^{(0)}$ ,  $y_{\sigma}^{(0)}$  рекуррентно построить векторы  $x_{\sigma}^{(2\mu)}$ ,  $y_{\sigma}^{(2\mu)}$  биортогональной системы, полученной из начальных векторов (3), аналогично тому, как  $q_{\sigma}^{(v)}$ ,  $e_{\sigma}^{(v)}$  получаются рекуррентно из  $q_{\sigma}^{(0)}$ ,  $e_{\sigma}^{(0)}$  по формулам (4) гл. II. Такой метод счета  $x_{\sigma}^{(2\mu)}$ ,  $y_{\sigma}^{(2\mu)}$  оказывается при этом устойчивым по отношению к ошибкам округления.

### § 3. Рекуррентные формулы для $x_{\sigma}^{(2\mu)}$ , $y_{\sigma}^{(2\mu)}$

В дальнейших рассуждениях будут участвовать связанные с ВО-алгоритмом многочлены  $p_{\sigma}(z)$ <sup>1</sup>. Используя величины  $a_{\sigma}$  и  $\beta_{\sigma}$  из (1), эти многочлены можно определить рекуррентно с помощью формул

$$\left. \begin{aligned} p_{-1}(z) &\equiv 0, \quad p_0(z) \equiv 1, \\ p_{\sigma+1}(z) &= (z - a_{\sigma+1}) p_{\sigma}(z) - \beta_{\sigma} p_{\sigma-1}(z), \\ \sigma &= 0, 1, 2, \dots, n-1. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Применяя эти многочлены, можно очень просто представить векторы  $x_{\sigma}$ ,  $y_{\sigma}$  ( $\sigma = 1, 2, \dots, n$ ); именно<sup>2</sup>)

$$x_{\sigma+1} = p_{\sigma}(A) x_1, \quad y_{\sigma+1} = p_{\sigma}(A^*) y_1. \quad (5)$$

Для дальнейшего нам нужны будут также и многочлены  $p_{\sigma}^{(2\mu)}$ , определяемые аналогичным образом с помощью начальных векторов

$$x_1^{(2\mu)} = A^{\mu} x_1^{(0)} \text{ и } y_1^{(2\mu)} = (A^*)^{\mu} y_1^{(0)}.$$

**ТЕОРЕМА 2.** Пусть на векторах  $x_1^{(0)}$ ,  $y_1^{(0)}$  построены: во-первых, константы Шварца  $s_{\kappa} = (A^{\kappa} x_1^{(0)}, y_1^{(0)})$ , QD-схема на этих константах в соответствии с § 2 гл. I и Р-схема в соответствии с § 4 гл. I; во-вторых, векторы  $x_1^{(2\mu)}$  и  $y_1^{(2\mu)}$  по формулам (3), ВО-алгоритм и на них многочлены  $p_{\sigma}^{(2\mu)}$  по формулам, аналогичным (4). Тогда эти многочлены  $p_{\sigma}^{(2\mu)}$  совпадают с одноименными многочленами 2μ-й наклонной строки Р-схемы.

<sup>1)</sup> Эти многочлены в работе [6], § 5 обозначены через  $p_{\sigma+1}(\lambda)$ .

<sup>2)</sup> Ср. работу [21], формулы (9), стр. 983. Векторы  $\xi_j$  соответствуют нашим  $x_{j+1}$ .

**Доказательство.** Если мы образуем константы Шварца  $s_{\kappa}^*$  с начальными векторами  $x_1^{(2\mu)}$ ,  $y_1^{(2\mu)}$  (вместо  $x_1^{(0)}$ ,  $y_1^{(0)}$ ), то в силу соотношения  $s_{\kappa}^* = s_{2\mu+\kappa}$  построенную на  $s_{\kappa}^*$  QD-схему и соответствующую Р-схему можно получить из QD- и Р-схем, построенных на константах  $s_{\kappa}$ , если отбросить в них 2μ верхних наклонных строк:

$$\begin{array}{ccccccccc} & & s_0 & & q_1^{(0)} & & e_1^{(0)} & & \\ & & & s_1 & q_1^{(1)} & & q_2^{(0)} & & \\ & & & & & s_2 & e_1^{(1)} & & e_2^{(0)} \\ & & & & & & & q_2^{(1)} & \\ & & & & & & & & \cdot \\ & & & & & \cdot & \cdot & & \cdot \\ & & & & & \cdot & \cdot & & \cdot \\ & & & & & \cdot & \cdot & & \cdot \\ & & & & & (x_1^{(2\mu)}, y_1^{(2\mu)}) = s_0^* = s_{2\mu} & & & \\ & & & & & & q_1^{(2\mu)} & & \\ & & & & & & & s_1^* = s_{2\mu+1} & e_1^{(2\mu)} \\ & & & & & & & q_1^{(2\mu+1)} & q_2^{(2\mu)} \\ & & & & & & & & e_2^{(2\mu)} \\ & & & & & & & & \cdot \\ & & & & & & & & \cdot \\ & & & & & & & & \cdot \end{array}$$

Следовательно, согласно § 8 гл. I, многочлены  $p_{\sigma}^{(2\mu)}$  из Р-схемы являются многочленами Ланцша для начальных векторов  $x_1^{(2\mu)}$ ,  $y_1^{(2\mu)}$ , что и требовалось доказать.

Формулы (5) позволяют выразить векторы  $x_{\sigma}^{(2\mu)}$ ,  $y_{\sigma}^{(2\mu)}$ , о которых идет речь в теореме 1, с помощью многочленов Р-схемы

$$\left. \begin{aligned} x_{\sigma+1}^{(2\mu)} &= p_{\sigma}^{(2\mu)}(A) x_1^{(2\mu)} = A^{\mu} p_{\sigma}^{(2\mu)}(A) x_1^{(0)}, \\ y_{\sigma+1}^{(2\mu)} &= p_{\sigma}^{(2\mu)}(A^*) y_1^{(2\mu)} = (A^*)^{\mu} p_{\sigma}^{(2\mu)}(A^*) y_1^{(0)}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Преимущество такого представления состоит в том, что для многочленов  $p_{\sigma}^{(2\mu)}$  существуют рекуррентные формулы, частично выведенные нами уже в § 4 гл. I. Из формул (5)

гл. I следует

$$zp_{\sigma-1}^{(2\mu+1)}(z) = p_\sigma^{(2\mu)}(z) + q_\sigma^{(2\mu)} p_{\sigma-1}^{(2\mu)}(z).$$

Далее, из формул (6) гл. I

$$zp_{\sigma-1}^{(2\mu+2)}(z) - zp_{\sigma-1}^{(2\mu+1)}(z) = -ze_{\sigma-1}^{(2\mu+1)} p_{\sigma-2}^{(2\mu+2)}(z).$$

Складывая, получаем

$$zp_{\sigma-1}^{(2\mu+2)}(z) = p_\sigma^{(2\mu)}(z) + q_\sigma^{(2\mu)} p_{\sigma-1}^{(2\mu)}(z) - ze_{\sigma-1}^{(2\mu+1)} p_{\sigma-2}^{(2\mu+2)}(z) \quad (7)$$

для  $\sigma = 1, 2, 3, \dots, n$  и всех  $\mu$  (следует учитывать, что  $e_0^{(v)} = 0$  и  $p_{n+1}^{(v)}(z) = 0$ ). Подставив в (7) на место переменной  $z$  матрицу  $A$ , умножив все равенство справа на  $x_1^{(2\mu)}$  и использовав формулу (6), получим

$$Ap_{\sigma-1}^{(2\mu+2)}(A)x_1^{(2\mu)} = x_{\sigma+1}^{(2\mu)} + q_\sigma^{(2\mu)}x_\sigma^{(2\mu)} - Ae_{\sigma-1}^{(2\mu+1)}p_{\sigma-2}^{(2\mu+2)}(A)x_1^{(2\mu)}$$

и, наконец, вследствие равенства  $Ax_1^{(2\mu)} = x_1^{(2\mu+2)}$

$$x_\sigma^{(2\mu+2)} = x_{\sigma+1}^{(2\mu)} + q_\sigma^{(2\mu)}x_\sigma^{(2\mu)} - e_{\sigma-1}^{(2\mu+1)}x_{\sigma-1}^{(2\mu+2)} \quad (8)$$

для  $\sigma = 1, 2, \dots, n$  и всех  $\mu$ . При этом  $e_0^{(2\mu+1)} = 0$  и  $x_{n+1}^{(2\mu)} = 0$ .

Эти формулы делают возможным рекуррентное вычисление упоминаемых в теореме 1 векторов  $x_1^{(2\mu)}, x_2^{(2\mu)}, \dots, x_n^{(2\mu)}$ , а тем самым и собственных векторов матрицы  $A$ : отдаваясь от векторов  $x_\sigma^{(0)}$ , формулы (8) последовательно применяют для  $\sigma = 1, 2, \dots, n$  при каждом фиксированном  $\mu$  ( $\mu = 0, 1, 2, \dots$ ). Аналогичные формулы можно, конечно, написать и для векторов  $y$ , но в дальнейшем они нам не будут нужны. Встречающиеся в формулах (8) скалярные величины  $q_\sigma^{(v)}$  и  $e_\sigma^{(v)}$  также получаются рекуррентно из  $q_\sigma^{(0)}$  и  $e_\sigma^{(0)}$  (см. § 4 гл. II). Нам надо будет, однако, получать и связанные с векторами  $x_\sigma^{(2\mu)}, y_\sigma^{(2\mu)}$  величины  $a_\sigma^{(2\mu)}, b_\sigma^{(2\mu)}$ , которые не входят в формулы (4) гл. II. В соответствии с § 8 гл. II их можно получить из  $q_\sigma^{(v)}$  и  $e_\sigma^{(v)}$ :

$$a_\sigma^{(2\mu+2)} = q_\sigma^{(2\mu+1)} + e_\sigma^{(2\mu+1)}, \quad b_\sigma^{(2\mu+2)} = q_{\sigma+1}^{(2\mu+1)}e_\sigma^{(2\mu+1)}, \quad (9)$$

в то время как  $q$  и  $e$  в свою очередь могут быть выражены по формулам (2) через  $a$  и  $b$ .

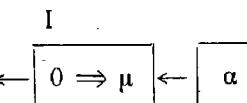
Собирая все вместе, мы получим *правило счета B* (см. стр. 69) для вычисления собственных векторов и

### Правило счета B

II

$$\left. \begin{array}{l} x_\sigma \Rightarrow x_\sigma^{(2\mu)} \\ a_\sigma \Rightarrow a_\sigma^{(2\mu)} \end{array} \right\} (\sigma = 1, 2, \dots, n)$$

$$\beta_\sigma \Rightarrow \beta_\sigma^{(2\mu)} \quad (\sigma = 1, 2, \dots, n-1)$$



VII

III

$$a_1^{(2\mu)} \Rightarrow q_1^{(2\mu)}$$

$$\frac{\beta_\sigma^{(2\mu)}}{q_\sigma^{(2\mu)}} \Rightarrow e_\sigma^{(2\mu)} \quad \left. \right\} (\sigma = 1, 2, \dots, n-1)$$

$$a_{\sigma+1}^{(2\mu)} - e_\sigma^{(2\mu)} \Rightarrow q_{\sigma+1}^{(2\mu)}$$

$$0 \Rightarrow e_0^{(2\mu+1)}, \quad 0 \Rightarrow e_n^{(2\mu)}$$

$$q_\sigma^{(2\mu)} + e_\sigma^{(2\mu)} - e_{\sigma-1}^{(2\mu+1)} \Rightarrow q_\sigma^{(2\mu+1)} \quad (\sigma = 1, 2, \dots, n)$$

$$\frac{e_\sigma^{(2\mu)} q_{\sigma+1}^{(2\mu)}}{q_\sigma^{(2\mu+1)}} \Rightarrow e_\sigma^{(2\mu+1)} \quad (\sigma = 1, 2, \dots, n-1)$$

V

$$0 \Rightarrow e_n^{(2\mu+1)}$$

$$q_\sigma^{(2\mu+1)} + e_\sigma^{(2\mu+1)} \Rightarrow a_\sigma^{(2\mu+2)} \quad (\sigma = 1, 2, \dots, n)$$

$$q_{\sigma+1}^{(2\mu+1)} e_\sigma^{(2\mu+1)} \Rightarrow b_\sigma^{(2\mu+2)} \quad (\sigma = 1, 2, \dots, n-1)$$

VI

$$0 \Rightarrow x_{n+1}^{(2\mu)}; \quad 0 \Rightarrow x_\sigma^{(2\mu+2)}$$

$$x_{\sigma+1}^{(2\mu)} + q_\sigma^{(2\mu)} x_\sigma^{(2\mu)} - e_{\sigma-1}^{(2\mu+1)} x_{\sigma-1}^{(2\mu+2)} \Rightarrow x_\sigma^{(2\mu+2)} \quad (\sigma = 1, 2, \dots, n)$$

собственных значений матрицы  $A$ . Так как для него необходимо знать получаемые с помощью ВС-алгоритма величины  $a_\sigma$ ,  $\beta_\sigma$  и  $x_\sigma$ , то предварительно необходимо провести вычисления согласно *правилу счета A*.

На стр. 71 мы приводим пример вычисления собственных векторов и собственных значений матрицы третьего порядка с помощью *правила счета B*. Пример (см. стр. 71), конечно, не дает возможности сравнить этот метод с другими для больших  $n$ .

В качестве матрицы  $A$  возьмем

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 6 \end{pmatrix}.$$

Отправляясь от векторов  $x_1 = y_1 = (1, 0, 0)$ , мы действуем сначала в соответствии с *правилом счета A*, а затем в соответствии с *правилом счета B*. В таблице на стр. 71 помещены исходные (для  $\mu = 0$ ) величины  $x_\sigma^{(0)}$ ,  $a_\sigma^{(0)}$ ,  $\beta_\sigma^{(0)}$  (получающиеся в результате применения *правила счета A*) и дальнейшие результаты вычислений, выполняемых в соответствии с *правилом счета B*. При  $\mu = 4$  получаются уже приближенные значения собственных чисел и собственных векторов.

Пример показывает, кроме того, что, хотя векторы  $x_\sigma^{(2\mu)}$  и сходятся по направлению, длина их может стремиться как к 0, так и к  $\infty$ . Вместо векторов  $x_\sigma^{(2\mu)}$  можно, однако, рассматривать векторы

$$\tilde{x}_\sigma^{(2\mu)} = \frac{x_\sigma^{(2\mu)}}{q_\sigma^{(0)} q_\sigma^{(2)} \dots q_\sigma^{(2\mu-2)}},$$

которые сходятся в обычном смысле, и соответствующим образом перестроить *правило счета B*. Этот вопрос относится уже к технике счета и здесь не будет рассматриваться.

Если матрица  $A$  имеет комплексные собственные значения, то последние попарно равны по модулю и, следовательно, теорему 1 применить нельзя. Тем не менее если  $\lambda_{m+1} = \bar{\lambda}_{m+2}$ , а модули других собственных значений не равны  $|\lambda_{m+1}|$ , то проведенная через  $x_{m+1}^{(2\mu)}$  и  $x_{m+2}^{(2\mu)}$

Численный пример к *правилу счета B*

Пусть  $A = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 6 \end{vmatrix}$ ,  $x_1^{(0)} = y_1^{(0)} = (1, 0, 0)$ . Получаем

	$x_\sigma^{(2\mu)}$ (3 компоненты)	$a_\sigma^{(2\mu)}$	$\beta_\sigma^{(2\mu)}$	$q_\sigma^{(2\mu)}$	$e_\sigma^{(2\mu+1)}$
$\mu = 0, \sigma = 1$	1	0	0	1	3,333333
	0	1	1	7	0,06486486
	0	-2	2	1	
$\mu = 1, \sigma = 1$	1	1	1	6,333333	0,2098004
	-3,333333	-0,333333	3,666667	2,531582	1,233286
	0,2162162	-0,3783784	0,1621622	0,1351351	$882,939 \cdot 10^{-6}$
$\mu = 2, \sigma = 1$	3	6	10	7,841379	7,841379
	-4,524138	-2,048276	2,586207	1,031476	0,003517833
	0,03167620	-0,04663441	0,01847779	0,1271447	$14,1984 \cdot 10^{-6}$
$\mu = 3, \sigma = 1$	19	45	81	7,872471	7,872471
	-4,567953	-2,261205	2,329831	1,0005101	$56,78990 \cdot 10^{-6}$
	0,004088905	0,005891999	0,002314207	0,1270169	1,000063
$\mu = 4, \sigma = 1$	145	352	640	7,872975	7,872975
	-4,581387	-2,287229	+2,295947	1,0000098	$0,0290936 \cdot 10^{-6}$
	520,4094 $\cdot 10^{-6}$	-747,8595 $\cdot 10^{-6}$	293,4175 $\cdot 10^{-6}$	0,1270167	

плоскость при  $\mu \rightarrow \infty$  стремится к плоскости, проведенной через собственные векторы  $v_{m+1}$  и  $v_{m+2} = v_{m+1}$ , в то время как многочлен

$$\lambda^2 - (a_{m+1}^{(2\mu)} + a_{m+2}^{(2\mu)})\lambda + (a_{m+1}^{(2\mu)}a_{m+2}^{(2\mu)} - \beta_{m+1}^{(2\mu)})$$

сходится к многочлену, корнями которого являются числа  $\lambda_{m+1}$  и  $\lambda_{m+2}$ . Собственные векторы  $v_{m+1}$  и  $v_{m+2}$  получаются как пределы выражения

$$x_{m+2}^{(2\mu)} + (\lambda - a_{m+2}^{(2\mu)})x_{m+1}^{(2\mu)},$$

в котором вместо  $\lambda$  подставлены соответственно  $\lambda_{m+1}$  или  $\lambda_{m+2}$ .

**Ошибка метода.** Если вычислительный процесс, задаваемый *правилом счета* В, оборвать на каком-то  $\mu$ , то получаемые при этом векторы  $x_\sigma^{(2\mu)}$  лишь приблизительно будут определять собственные векторы матрицы  $A$ . Ошибку проще всего оценить с помощью соотношения

$$Ax_\sigma^{(2\mu)} = x_{\sigma+1}^{(2\mu)} + a_\sigma^{(2\mu)}x_\sigma^{(2\mu)} + \beta_{\sigma-1}^{(2\mu)}x_{\sigma-1}^{(2\mu)}, \quad (10)$$

где, естественно, следует считать  $\beta_0^{(2\mu)} = 0$  и  $x_{n+1}^{(2\mu)} = 0$ . Формула (10) основана на том, что для каждого  $\mu$  векторы  $x_\sigma^{(2\mu)}$  и  $y_\sigma^{(2\mu)}$  образуют биортогональную систему Ланцюша, а  $a_\sigma^{(2\mu)}$  и  $\beta_\sigma^{(2\mu)}$  являются элементами соответствующей якобиевой формы для матрицы  $A$ . Если при проведении расчетов получить также и векторы  $y_\sigma^{(2\mu)}$ , то для контроля можно использовать биортогональность систем векторов  $x_\sigma^{(2\mu)}$  и  $y_\sigma^{(2\mu)}$ .

#### § 4. Способ вычисления собственных векторов с квадратичной сходимостью

QD-алгоритм в той форме, как он был до сих пор изложен (исключая § 8 гл. II), давал линейную сходимость; скорость стремления  $q_\sigma^{(v)} \rightarrow \lambda_\sigma$  и  $e_\sigma^{(v)} \rightarrow 0$  ( $v \rightarrow \infty$ ), как это утверждается в теореме 5 гл. I, примерно такая же, как у геометрической прогрессии. То же самое следует сказать и о векторах  $x_\sigma^{(2\mu)}$ , получаемых с помощью *правила счета* В. Однако для симметрических матриц  $A$  сходимость вычисленных значений к собственным числам

и собственным векторам можно значительно ускорить. Принцип этого ускорения сходимости тот же самый, что и в § 8 гл. II; он основан на сдвиге координатной системы в  $\lambda$ -плоскости. Для дальнейшего мы предположим, что все собственные значения матрицы  $A$  простые и упорядочены по величине:

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \dots > \lambda_n.$$

Мы отправляемся от величин  $x_\sigma^{(0)}$ ,  $a_\sigma^{(0)}$ ,  $\beta_\sigma^{(0)}$ , полученных из какого-либо начального вектора<sup>1)</sup> с помощью ВО-алгоритма Ланцюша. Применяя *правило счета* В, можно шаг за шагом получить  $a_\sigma^{(2)}$ ,  $\beta_\sigma^{(2)}$ ,  $x_\sigma^{(2)}$ , затем  $a_\sigma^{(4)}$ ,  $\beta_\sigma^{(4)}$ ,  $x_\sigma^{(4)}$  и т. д.

Нетрудно заметить, что ВО-алгоритм в сущности инвариантен по отношению к сдвигам спектра, точнее, если его проводить с тем же начальным вектором, но с матрицей  $\hat{A} = A - tE$  вместо матрицы  $A$ , то заменится лишь  $a_\sigma$  на  $\hat{a}_\sigma = a_\sigma - t$ ; все  $x$  и  $\beta$  остаются неизменными. Следовательно, если вычислить в соответствии с *правилом счета* А величины  $a_\sigma$ ,  $\beta_\sigma$  и  $x_\sigma$ , заменить  $a_\sigma$  на

$$\hat{a}_\sigma = a_\sigma - t \quad (\sigma = 1, 2, \dots, n),$$

то весь дальнейший вычислительный процесс, выполняемый в соответствии с *правилом счета* В, протекает так, как будто мы проводим его для матрицы  $A - tE$ , а не для матрицы  $A$ : вместо величин  $\beta_\sigma^{(2\mu)}$ , которые стремятся к 0 как  $(\lambda_{\sigma+1}/\lambda_\sigma)^{2\mu}$ , теперь появляются величины  $\hat{\beta}_\sigma^{(2\mu)}$ , стремящиеся к 0 уже как  $[(\lambda_{\sigma+1} - t)/(\lambda_\sigma - t)]^{2\mu}$ .

В качестве  $t$  удобно выбирать приближенное значение для наименьшего по абсолютной величине собственного значения  $\lambda_n$ ; тогда  $(\lambda_n - t)(\lambda_{n-1} - t)$  мало и, следовательно,  $\hat{\beta}_{n-1}^{(2\mu)}$  быстро стремится к 0 (точно так же, как  $a_n^{(2\mu)}$  к  $\lambda_n - t$ , а  $\hat{x}_n^{(2\mu)}$  к  $v_n$ ). Сходимость метода, хотя она и будет ускорена, останется тем не менее линейной. Однако после одного шага этого вычислительного про-

<sup>1)</sup> Если для симметрической матрицы  $A$  в качестве начальных выбрать равные векторы  $x_1 = y_1$ , то и последующие получаемые с помощью ВО-алгоритма векторы совпадают:  $x_\sigma = y_\sigma$  для всех  $\sigma$ ; таким образом, можно иметь дело лишь с одной системой векторов; эта система ортогональна.

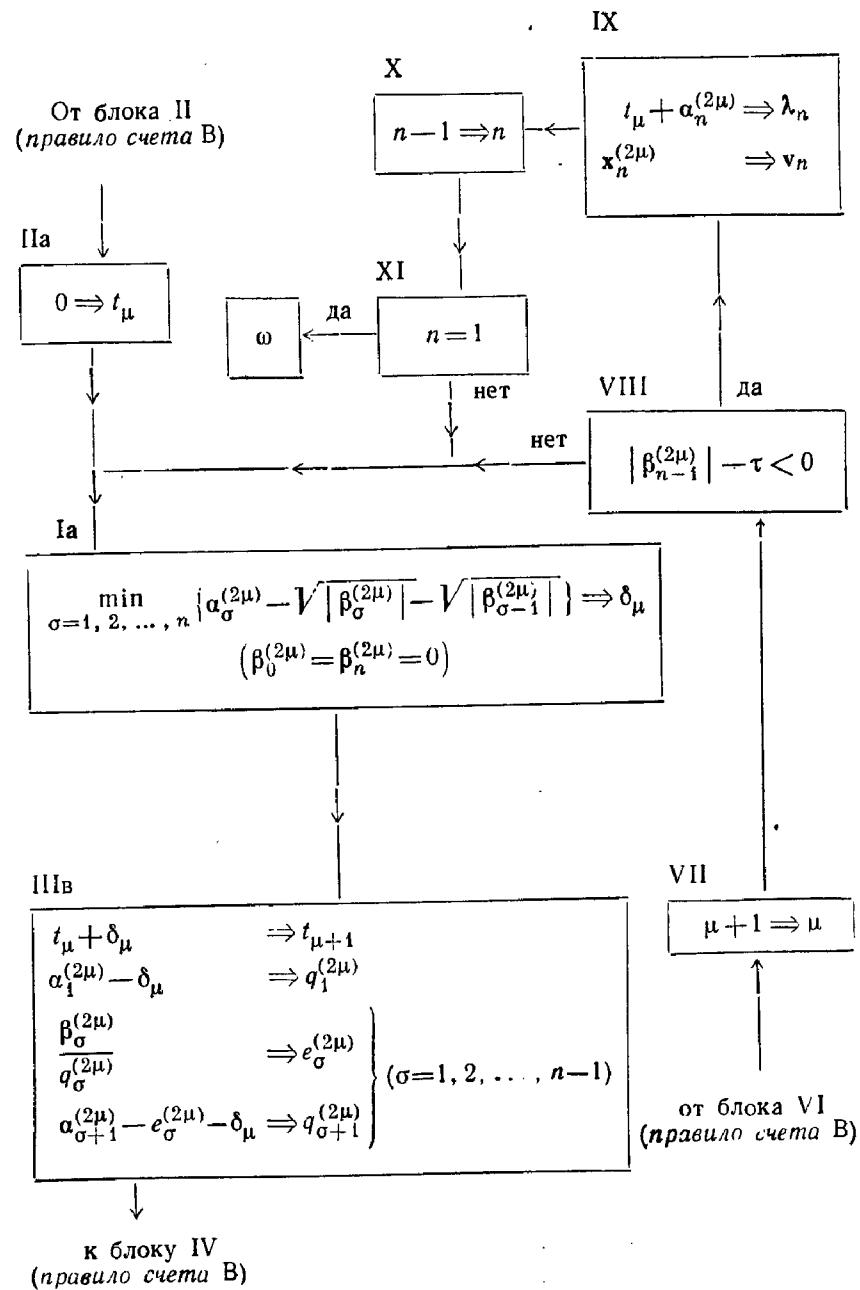
цесса, используя новое значение  $\beta_{n-1}^{(2\mu)}$ , можно получить более точное приближение для  $\lambda_n$  и использовать его для дальнейшего сдвига спектра. В этом случае сходимость будет все время ускоряться, пока, наконец,  $\hat{x}_{n-1}^{(2\mu)}$  не станет настолько мало, что  $\hat{x}_n^{(2\mu)}$  практически совпадет с собственным вектором, а подпространство, порожденное векторами  $\hat{x}_1^{(2\mu)}, \hat{x}_2^{(2\mu)}, \dots, \hat{x}_{n-1}^{(2\mu)}$ , будет инвариантным для  $A$ . Величины  $a_n, \beta_{n-1}$  и  $x_n$  можно тогда просто отбросить, а вычисления продолжать с остающимися числами и векторами. Это означает, другими словами, что отщепляется собственный вектор  $v_n$ , а вычисления продолжаются для подпространства, порожденного остальными собственными векторами, и так до тех пор, пока не будут получены все собственные векторы.

Собрав вместе все эти рассуждения, можно сформулировать *правило счета С*, состоящее из блоков I, II, IV, V и VI *правила счета В*, и схемы, приведенной на стр. 75.

Практические расчеты показали, что в качестве начала координат целесообразно выбирать нижнюю грань для оставшихся собственных значений матрицы  $A$ : если после  $\mu$  шагов начало координат сдвинулось в целом на величину  $t$ , то в следующем шаге оно сдвигается на  $\delta_\mu$ , где в качестве  $\delta_\mu$  выбирается возможно более точная нижняя грань для собственных значений якобиевой матрицы

$$J^{(2\mu)} = \begin{pmatrix} \alpha_1^{(2\mu)} & \beta_1^{(2\mu)} & 0 & \dots & 0 \\ 1 & \alpha_2^{(2\mu)} & \beta_2^{(2\mu)} & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \alpha_3^{(2\mu)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \alpha_{n-1}^{(2\mu)} & \beta_{n-1}^{(2\mu)} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & \alpha_n^{(2\mu)} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

В блоке IIIa *правила счета С* использованы формулы Гершгорина [16] для нижней грани собственных значений матрицы (11), однако могут быть применены и другие, возможно, лучшие способы.

*Правило счета С*

Определение собственных векторов в конечное число шагов. Численные просчеты показали, что лучше всего сначала найти только собственные значения изложенным в § 1 методом и лишь потом применять правило счета С, выбирая  $\delta_\mu$  так, чтобы  $t_\mu$  принимало последовательно значения всех  $n$  собственных чисел. Таким способом через  $n$  шагов получаются все  $n$  собственных векторов.

### § 5. Собственные значения и собственные векторы бесконечных симметрических матриц

Для бесконечных матриц или для интегральных операторов невозможно, конечно, довести до конца ВО-алгоритм Ланцоша<sup>1)</sup>, что необходимо для того, чтобы начать счет по правилам счета В или С. На практике то же самое случается и для конечных матриц очень большого порядка.

Но, как известно, некоторые сведения о наибольшем собственном значении симметрической положительно определенной матрицы или оператора можно получить и из неполной ортогональной системы Ланцоша и соответствующих величин  $\alpha$  и  $\beta$ . При попытке получить более точные результаты (см. § 2), даже предварительно умножив начальный вектор  $x_1$  на  $A^{-1}$  (так называемая «предитерация»), все равно сталкиваются с трудностями, уже упоминавшимися в § 2. Поэтому представляло бы определенный интерес применить развитые в § 3 методы также и в этом случае.

В дальнейшем мы будем предполагать, что нам задана симметрическая положительно определенная матрица  $A$ . Выполнив с надлежащим<sup>2)</sup> вектором  $x_1$  вычисления в соответствии с правилом счета А до  $\sigma = m$  включительно, мы получим ортогональную систему векторов (неполная ортогональная система Ланцоша)

$$x_1, x_2, \dots, x_m$$

и соответствующие скаляры  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m; \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{m-1}$ . Здесь  $m$  — некоторое заранее выбираемое целое число  $< n$ ; указанный далее метод позволит вычи-

<sup>1)</sup> Сравни стр. 73.

<sup>2)</sup> О выборе начального вектора см. примечание на стр. 65.

слить  $m$  наибольших собственных значений и соответствующие собственные векторы.

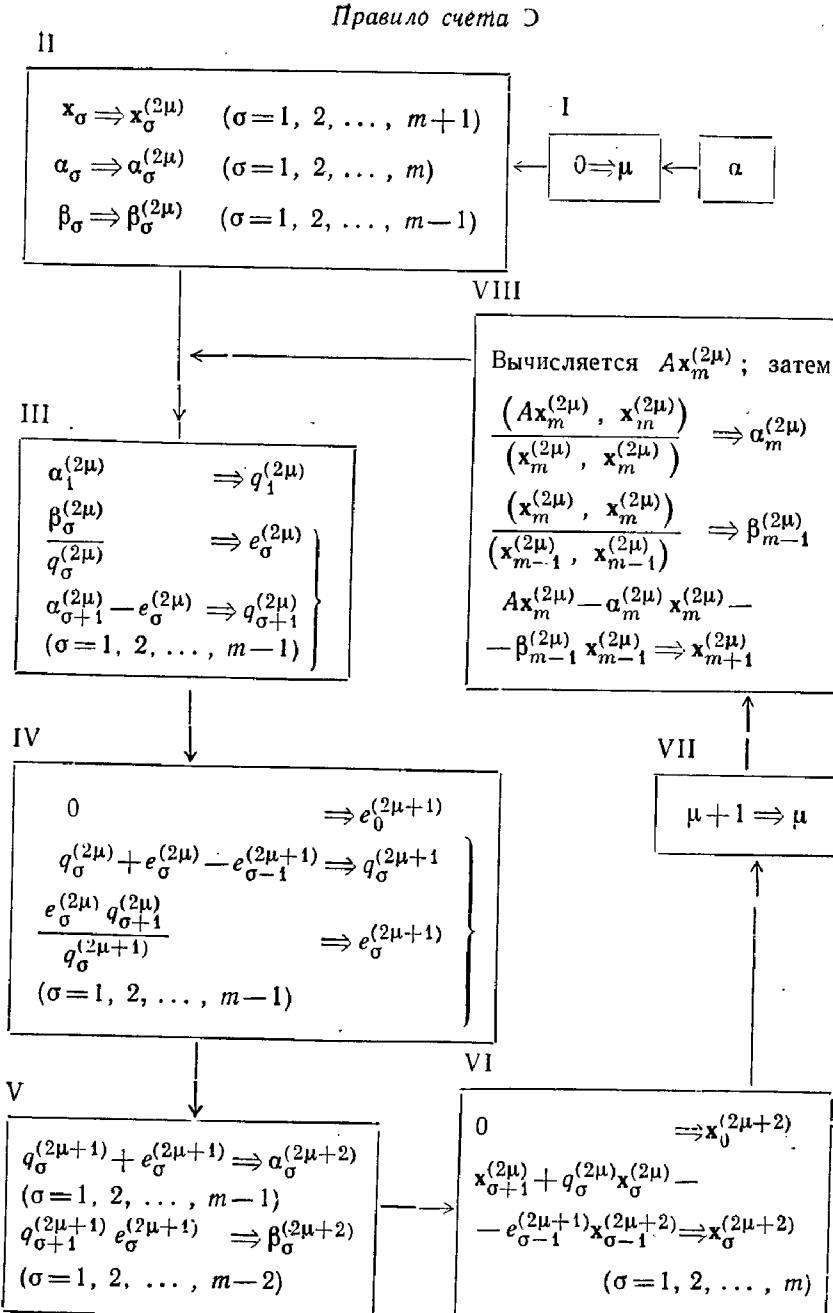
Величины  $\alpha_1, \dots, \alpha_m; \beta_1, \dots, \beta_{m-1}; x_1, \dots, x_m$ , а также вектор  $x_{m+1}$ , сосчитанный по формулам (1) для  $\sigma = m$ , являются исходными для дальнейших вычислений, а поэтому они всюду ниже снабжены верхним индексом (0). По  $\alpha_\sigma^{(0)}$  и  $\beta_\sigma^{(0)}$  вычисляются с помощью формул блока III правила счета В величины  $q_1^{(0)}, \dots, q_m^{(0)}; e_1^{(0)}, \dots, e_{m-1}^{(0)}$ . Далее, по формулам блока IV вычисляются  $q_1^{(1)}, \dots, q_{m-1}^{(1)}$ ;  $e_1^{(1)}, \dots, e_{m-1}^{(1)}$ , однако вычислить  $q_m^{(1)}$  нельзя, так как отсутствует необходимая для этого величина  $e_m^{(0)}$ . Точно так же по формулам блока V получают  $\alpha_1^{(2)}, \dots, \alpha_{m-1}^{(2)}; \beta_1^{(2)}, \dots, \beta_{m-2}^{(2)}$ . Находящиеся в блоке VI правила счета В формулы позволяют теперь вычислить векторы

$$x_1^{(2)}, \dots, x_m^{(2)},$$

поскольку вектор  $x_{m+1}^{(2)}$  с самого начала предполагался известным.

Для того чтобы продолжить таким способом вычисления дальше, нам надо определить еще  $\alpha_m^{(2)}, \beta_{m-1}^{(2)}$  и  $x_{m+1}^{(2)}$ . Поскольку векторы  $x_\sigma^{(2)}$  образуют ортогональную систему Ланцоша с начальным вектором  $x_1^{(2)}$ , недостающие величины  $\alpha_m^{(2)}, \beta_{m-1}^{(2)}$  и  $x_{m+1}^{(2)}$  можно вычислить по формулам (1) для  $\sigma = m$ . Все вместе это дает нам правила счета D (см. стр. 78).

Сосчитанные таким образом числа  $\alpha_1^{(2\mu)}, \dots, \alpha_m^{(2\mu)}$  сходятся при  $\mu \rightarrow \infty$  к  $m$  наибольшим собственным значениям матрицы  $A$ , а векторы  $x_1^{(2\mu)}, \dots, x_m^{(2\mu)}$  — к соответствующим собственным векторам. В противоположность правилу счета В здесь на каждом шаге требуется дополнительного произвести одно умножение матрицы на вектор. Это, очевидно, является платой за то, что мы пользуемся неполной ортогональной системой Ланцоша. Тем не менее совершенно очевидно преимущество этого метода перед другими, если заметить, что на каждом шаге итерационного процесса, который улучшает сразу  $m$  векторов  $x_\sigma^{(2\mu)}$ , приходится выполнять только одно умножение матрицы на вектор.



Замечания к правилу счета D. а) с точки зрения техники счета может оказаться выгодным вообще не считать вектор  $x_{m+1}^{(2\mu)}$  (см. блок VIII), а сразу подставить выражение для  $x_{m+1}^{(2\mu)}$  в формулы (8) ( $\sigma = m$ ); после некоторых преобразований мы получим тогда соотношение

$$\begin{aligned} x_m^{(2\mu+2)} &= Ax_m^{(2\mu)} - (e_{m-1}^{(2\mu)} + e_{m-1}^{(2\mu+1)}) x_{m-1}^{(2\mu+2)} - \\ &- e_{m-1}^{(2\mu)} e_{m-2}^{(2\mu+1)} x_{m-2}^{(2\mu+2)}. \end{aligned} \quad (12)$$

При вычислении  $x_m^{(2\mu+2)}$  надо тогда применять формулу (12), а не формулы (8) при  $\sigma = m$  (в *правиле счета D* — непосредственно после блока VI).

б) В то время как формулы блока VI *правила счета D* не особенно восприимчивы к ошибкам округления, процесс получения  $x_{m+1}^{(2\mu)}$ , особенно для больших  $\mu$ , очень чувствителен к ним (блок VIII). Поэтому рекомендуется после вычисления вектора  $x_{m+1}^{(2\mu)}$  по формулам блока VIII подвергнуть его «дополнительной ортогонализации», воспользовавшись ортогональностью системы всех векторов  $x_\sigma^{(2\mu)}$ . Это свойство ортогональности можно, конечно, использовать и для контроля счета.

с) При выполнении вычислений в соответствии с *правилом счета D* также можно улучшить сходимость, осуществляя подходящий сдвиг спектра на каждом итерационном шаге. Если собственные значения  $\lambda_\mu$  матрицы  $A$  занумерованы по убыванию их величины и  $\lambda_m$  — наименьшее из интересующих нас собственных значений, то сдвиги  $\delta_\mu$  спектра надо выбирать так, чтобы получающиеся по формулам блока IIIb *правила счета C* величины  $t_\mu$  возможно более плотно располагались на интервале  $0 < \lambda < \lambda_m$ . Такой способ ускорения сходимости известен под названием *сверхрелаксации*.

§ 1. LR-преобразование<sup>1)</sup>

Дальнейшие рассуждения основываются на формулах (10) и (11) (гл. II). Из этих формул видно, что прогрессивная форма QD-алгоритма по существу состоит в том, что, отправляясь от непрерывной дроби типа  $S$  для функции  $f_0(z)$ , последовательно вычисляются непрерывные дроби  $S_1, S_2, \dots$  (типа  $S$ ) для введенных в § 5 гл. I функций  $f_h(z)$ . При этом в качестве промежуточных результатов получаются также непрерывные дроби  $J_1, J_2, \dots$  типа  $J$  для тех же функций  $f_h(z)$ . Формулы (10) гл. II дают правило построения дроби  $J_{v+1}$  по дроби  $S_v$ , тогда как формулы (11) гл. II позволяют получить  $S_{v+1}$  по  $J_v$ .

Как известно, непрерывная дробь

$$f(z) = \frac{s}{|z-a_1|} - \frac{\beta_1}{|z-a_2|} - \dots - \frac{\beta_{n-1}}{|z-a_n|}$$

тесно связана с матрицей

$$J = \begin{pmatrix} a_1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \beta_1 & a_2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & \beta_2 & a_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \beta_{n-1} a_n \end{pmatrix}. \quad (1)$$

В частности, собственные значения матрицы (1) являются одновременно полюсами функции  $f(z)$ , а собственные векторы связаны с разложением  $f(z)$  на простейшие дроби. Но особый интерес представляет тот факт, что формулы (11) гл. II определяют разложение матрицы (1) в произведение двух треугольных матриц (индекс  $v+1$  заменен

на индекс  $v$ ):

$$\begin{pmatrix} a_1^{(v)} & 1 & & & \\ \beta_1^{(v)} & a_2^{(v)} & 1 & & \\ & \beta_2^{(v)} & & 1 & \\ & & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-1}^{(v)} & a_n^{(v)} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ e_1^{(v)} & 1 & & & \\ & e_2^{(v)} & 1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & e_{n-1}^{(v)} & 1 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} q_1^{(v)} & 1 & & & \\ q_2^{(v)} & 1 & & & \\ & \ddots & 1 & & \\ & & & q_n^{(v)} & \end{pmatrix}, \quad (2)$$

тогда как формулы (10) гл. II показывают, чему равно произведение тех же треугольных матриц, записанных в другом порядке:

$$\begin{pmatrix} q_1^{(v)} & 1 & & & \\ q_2^{(v)} & 1 & & & \\ & \ddots & 1 & & \\ & & & q_n^{(v)} & \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ e_1^{(v)} & 1 & & & \\ & e_2^{(v)} & 1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & e_{n-1}^{(v)} & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} a_1^{(v+1)} & 1 & & & 0 \\ \beta_1^{(v+1)} & a_2^{(v+1)} & 1 & & 0 \\ \beta_2^{(v+1)} & a_3^{(v+1)} & & 1 & \\ & \ddots & & & \\ 0 & & & & \beta_{n-1}^{(v+1)} a_n^{(v+1)} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Следовательно, собственные значения якобиевой матрицы  $J$  можно найти, разлагая эту матрицу в произведение двух треугольных матриц и перемножая затем эти треугольные матрицы в другом порядке; повторяя этот процесс для вновь образованной  $J$ -матрицы, получаем бесконечную последовательность  $J_0, J_1, J_2, \dots$   $J$ -матриц,

<sup>1)</sup> Обстоятельное изложение этого метода см. в работе [19].

обладающую (при условии, что абсолютные величины всех собственных значений матрицы различны) следующим свойством:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} J_k = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 & & \\ & \lambda_2 & 1 & 0 \\ & & \lambda_3 & \\ 0 & & & \ddots & 1 \\ & & & & \lambda_n \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Естественно попробовать то же самое для произвольной квадратной матрицы: отправляясь от матрицы  $A = A_1$ , образуем последовательно для  $k = 1, 2, \dots$

- 1) разложение на треугольные матрицы  $A_k \Rightarrow L_k R_k$ ,  
 2) произведение  $R_k L_k \Rightarrow A_{k+1}$ . } (5)

Треугольные матрицы  $L$  и  $R$  определяются при этом однозначно, если мы придадим определенные значения диагональным элементам одной из этих матриц (например,  $L$ )

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{pmatrix}; \quad R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1n} \\ r_{22} & r_{23} & \dots & r_{2n} \\ r_{33} & \dots & r_{3n} \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & & & \ddots & r_{nn} \end{pmatrix}.$$

Вычисление элементов  $l_{ih}$  и  $r_{ih}$ , располагаемых обычно в виде одной матрицы

$$\left( \begin{array}{c|ccccc} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1n} \\ \hline l_{21} & r_{22} & r_{23} & \dots & r_{2n} \\ l_{31} & l_{32} & r_{33} & \dots & r_{3n} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & \overline{l_{n,n-1}} & r_{nn} \end{array} \right),$$

целесообразно проводить по формулам, приведенным у Цурмюля [17] на стр. 98 – 99.

С помощью формул (5) можно образовать<sup>1)</sup> бесконечную последовательность  $A_1, A_2, A_3, \dots$  подобных друг другу матриц:

$$A_{k+1} = R_k L_k = L_k^{-1} L_k R_k L_k = L_k^{-1} A_k L_k. \quad (6)$$

При определенных условиях<sup>2)</sup>, которые, в частности, всегда выполняются для симметрических положительно определенных матриц, имеет место сходимость

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A_k = \begin{pmatrix} \lambda_1 & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ \lambda_2 & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \lambda_3 & \dots & a_{3n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & & & \ddots & \lambda_n \end{pmatrix}, \quad (7)$$

так что указанным способом можно вычислить собственные значения матрицы  $A$ . Из-за большой вычислительной работы, необходимой для разложения целиком заполненной матрицы  $A$  на треугольные, этот способ в общем случае представляет скорее теоретический интерес.

Существует, однако, класс матриц, для которых изложенный метод превосходит, возможно, все другие; речь идет о матрицах, обладающих свойством

$$a_{ik} = 0 \text{ для } |i - k| > m. \quad (8)$$

Это свойство сохраняется при LR-преобразовании; наряду с  $A_1$  им обладают как все  $A_k$ , так и все треугольные матрицы  $L_k$  и  $R_k$ , причем ошибки округления не нарушают этого свойства. Для матриц, удовлетворяющих условию (8), объем вычислительной работы при разложении их в произведение треугольных существенно меньше, чем объем вычислительной работы для полных матриц; а именно  $(n^3 - n)/3$  операций умножения и деления для полной матрицы и  $m(m+1)(3n - 2m - 1)/3$

<sup>1)</sup> Определяемое формулами (5) или (6) правило вычисления  $A_{k+1}$  по  $A_k$  называется LR-преобразованием.

<sup>2)</sup> Более детальное изложение можно найти в [19], § 3.

операций умножения и деления для матрицы, удовлетворяющей условию (8).

При реализации этого метода на вычислительных машинах может представлять интерес также то, что необходимый объем запоминающего устройства существенно сокращается для матриц, удовлетворяющих условию (8): от  $n^2$  ячеек до  $(m+1)(2n-m)-n$  ячеек.

Например, этот способ может оказаться очень удобным при решении дифференциального уравнения Хилла; задачу о нахождении собственных значений для этого уравнения можно свести к задаче нахождения собственных значений бесконечной матрицы, а последнюю при численных расчетах заменить конечной, удовлетворяющей условию (8). Для современных вычислительных машин с большими запоминающими устройствами случай с  $m=10$  и  $n=500$  не представляет затруднений; объем вычислительной работы для одного LR-шага был бы примерно таким же, как при обращении полной матрицы 50-го порядка.

Следует еще отметить, что сходимость может быть различным способом ускорена; в частности, можно сдвинуть начало координат  $\lambda$ -плоскости аналогично тому, как это сделано в § 4 гл. III (см. также работу [20]).

## § 2. Непрерывный аналог QD-алгоритма<sup>1)</sup>

Если функция  $F(t)$  удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению  $n$ -го порядка с постоянными коэффициентами, то функция

$$f(z) = \sum_0^{\infty} \frac{F(vh)}{z^{v+1}}$$

при постоянном  $h$ , как известно, является рациональной, причем знаменателем служит многочлен степени  $n$ . Следовательно, при построении QD-схемы на величинах  $s_v = F(vh)$  должны обратиться в нуль  $n$ -е модифицированные разности  $e_n^{(v)}$  (см. гл. I, теорема 4).

<sup>1)</sup> Подробно это изложено в работе [18].

Итак, QD-схема обладает здесь свойствами, аналогичными схеме образования обычных разностей для многочлена. Естественно поэтому попробовать совершить предельный переход при  $h \rightarrow 0$ , который в схеме образования обычных разностей приводит к производной функции.

Однако если совершить предельный переход при  $h \rightarrow 0$  в QD-схеме, построенной на  $F(vh)$ , то  $q_{\sigma}^{(v)}$  будут стремиться к 1, а  $e_{\sigma}^{(v)}$  — к 0. Нетривиальные предельные переходы возникают, если рассматривать  $(q_{\sigma}^{(v)} - 1)/h$  и  $e_{\sigma}^{(v)}/h^2$ .

В работе [18] показано, что при  $h \rightarrow 0$  и  $v = t/h$  имеют место равенства

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{q_{\sigma}^{(v)} - 1}{h} = Q_{\sigma}(t), \quad \lim_{h \rightarrow 0} \frac{e_{\sigma}^{(v)}}{h^2} = E_{\sigma}(t), \quad (9)$$

а правила ромба переходят при этом в соотношения<sup>1)</sup>

$$\left. \begin{aligned} Q'_{\sigma}(t) &= E_{\sigma}(t) - E_{\sigma-1}(t), \\ \frac{E'_{\sigma}(t)}{E_{\sigma}(t)} &= Q_{\sigma+1}(t) - Q_{\sigma}(t). \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Отправляясь от  $Q_1(t) = F'(t)/F(t)$  и  $E_0(t) = 0$  и применяя попаременно 1-е и 2-е соотношения (10), мы получаем последовательность функций  $E_1, Q_2, E_2, Q_3, E_3, \dots$

Свойства QD-алгоритмов, выведенные в § 7 гл. I, переносятся на функции  $Q_{\sigma}(t)$  и  $E_{\sigma}(t)$ :

**Теорема 1.** Если функция  $F(t)$  удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению  $n$ -го порядка с постоянными коэффициентами, то  $E_n(t) = 0$ .

**Теорема 2.** Если функция  $F(t)$  представляется в виде конечной суммы

$$F(t) = \sum_1^n c_k e^{\lambda_k t} \quad (c_k \neq 0),$$

<sup>1)</sup> Они могут быть получены из формул (8) работы [18] исключением величин  $S_{\sigma}(t), S_{\sigma+1}(t), D_{\sigma}(t)$ .

причем  $\operatorname{Re}(\lambda_1) > \operatorname{Re}(\lambda_2) > \dots > \operatorname{Re}(\lambda_n)$ , то

$$\lim_{t \rightarrow \infty} Q_\sigma(t) = \lambda_\sigma^{-1}. \quad (11)$$

**ПРИМЕР К ТЕОРЕМАМ 1 И 2.** Для  $F(t) = \operatorname{ch}(t)$  имеем  $Q_1(t) = \operatorname{th}(t)$ ,  $E_1(t) = 1/\operatorname{ch}^2(t)$ ,  $Q_2(t) = -\operatorname{th}(t)$  и, конечно,  $E_2(t) = 0$ .

Важный результат получается в этой связи, если мы совершим предельный переход  $h \rightarrow 0$  в формуле

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s_v + \kappa}{z^{n+1}} = \frac{s_v}{|z - q_1^{(v)}|} - \frac{e_1^{(v)} q_1^{(v)}}{|z - q_2^{(v)} - e_1^{(v)}|} - \\ - \frac{e_2^{(v)} q_2^{(v)}}{|z - q_3^{(v)} - e_2^{(v)}|} - \dots - \frac{e_{n-1}^{(v)} q_{n-1}^{(v)}}{|z - q_n^{(v)} - e_{n-1}^{(v)}|}.$$

Умножая обе части равенства на  $h$ , полагая  $z = e^{ht}$  и переходя к пределу, получаем

$$\int_0^{\infty} e^{-t\zeta} F(a+t) dt = \frac{F(a)}{|\zeta - Q_1(a)|} - \frac{E_1(a)}{|\zeta - Q_2(a)|} - \dots - \frac{E_{n-1}(a)}{|\zeta - Q_n(a)|}, \quad (12)$$

где положено  $hv = a$ ,  $s_\kappa = F(xh)$  и предполагается, что выполнены условия теоремы 1. Эта формула, позволяющая вычислять преобразование Лапласа для функции  $F(t)$ , чисто формальная, но она справедлива и в том случае, когда  $F(t)$  не удовлетворяет линейному дифференциальному уравнению с постоянными коэффициентами: в формуле (12) надо лишь писать бесконечную непрерывную дробь. Конечно, в каждом конкретном случае надо проверять, следует ли из этого формального соответствия фактическое равенство.

**ПРИМЕР:**

$$F(t) = e^{-t^2/2}, \quad Q_1(t) = -t,$$

$$E_1(t) = Q'_1(t) = -1, \quad Q_2(t) = Q_1(t) + \frac{E'_1}{E_1} = -t,$$

$$E_2(t) = E_1(t) + Q'_2(t) = -2, \quad Q_3(t) = Q_2(t) + \frac{E'_2}{E_2} = -t \text{ и т. д.}$$

<sup>1)</sup> Это предельное соотношение несущественно изменяется, если  $F(t)$  имеет конечное число действительных полюсов. (Во всяком случае, все функции  $Q_\sigma(t)$ ,  $E_\sigma(t)$  мероморфны.)

В общем случае

$$Q_\sigma(t) = -t, \quad E_\sigma(t) = -\sigma.$$

Следовательно,

$$\Omega(e^{-t^2/2}) \sim \frac{1}{1-\zeta} + \frac{1}{1-\zeta} + \frac{2}{1-\zeta} + \frac{3}{1-\zeta} + \frac{4}{1-\zeta} + \dots \quad (13)$$

Непрерывная дробь (13) сходится в открытой правой полуплоскости и совпадает там с функцией  $\Omega(e^{-t^2/2})$ . Эта дробь сходится также и в левой полуплоскости, но не к  $\Omega(e^{-t^2/2})$ .

Так же как QD-алгоритм, непрерывный аналог имеют и связанные с ним LR-преобразования (см. § 11 работы [19]). Рассмотрим матричное дифференциальное уравнение

$$A'(t) = Y(t) X(t) - X(t) Y(t), \quad (14)$$

где  $X(t)$  и  $Y(t)$  определяются через  $A(t) = (a_{ik})$  следующим образом:

$$X(t) = \begin{pmatrix} 0 & & & & & 0 \\ a_{21} & 0 & & & & \\ a_{31} & a_{32} & & & & \\ \vdots & & & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix},$$

$$Y(t) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & 0 & & & a_{nn} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

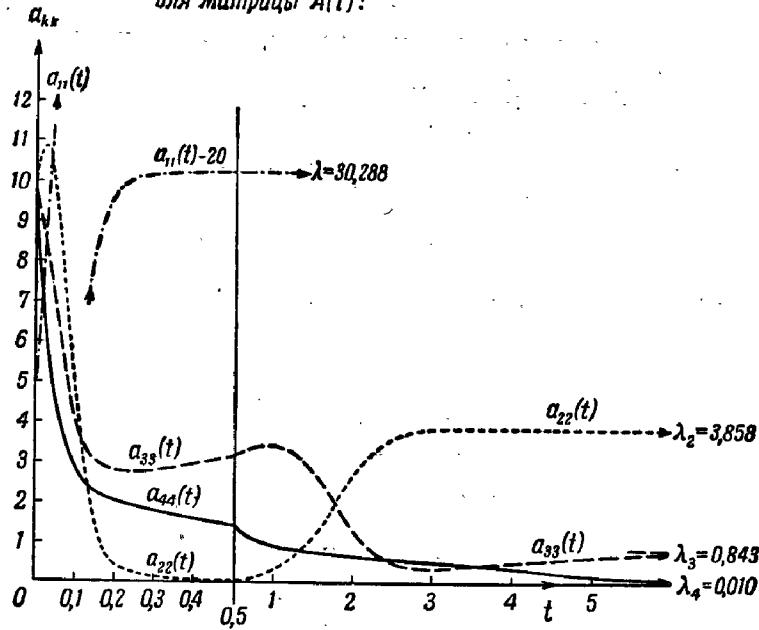
Если проинтегрировать дифференциальное уравнение (14) с начальным значением  $A(0) = A$ , то при определенных условиях <sup>1)</sup> предел  $\lim_{t \rightarrow \infty} A(t)$  существует и представляет собой подобную  $A$  верхнюю треугольную матрицу.

<sup>1)</sup> См. § 11 работы [19].

Численный пример:

$$A(0) = \begin{pmatrix} 5 & 7 & 6 & 5 \\ 7 & 10 & 8 & 7 \\ 6 & 8 & 10 & 9 \\ 5 & 7 & 9 & 10 \end{pmatrix}.$$

Поведение диагональных элементов для матрицы  $A(t)$ :



### § 3. QD-релаксация

Пусть требуется решить систему линейных уравнений  $Ax = b$ . Пусть вектор  $x_0$  является приближенным решением этой системы, а

$$Ax_0 - b = r_0 \quad (16)$$

— соответствующий вектор невязки. Мы предположим, что матрица  $A$  симметрическая, положительно определенная и появилась в связи с решением какой-либо конечно-разностной системы уравнений, так что можно говорить

о таких вещах, как гладкость решения и гладкость распределения невязок.

Точное решение  $x$  может быть получено теперь из  $x_0$  по формуле

$$x = x_0 - A^{-1}r_0, \quad (17)$$

причем  $A^{-1}r_0$  можно выразить через «итерированные невязки»  $r_k = A^k r_0$  с помощью соотношения Кели — Гамильтона, если только известен характеристический многочлен матрицы  $A$ : если

$$|zE - A| = z^n + c_1 z^{n-1} + \dots + c_n,$$

то

$$-A^{-1}r_0 = \frac{r_{n-1} + c_1 r_{n-2} + \dots + c_{n-1} r_0}{c_n}. \quad (18)$$

Эти формулы нельзя рекомендовать ввиду неизбежных ошибок в связи с округлением. Если, однако, распределение невязок достаточно гладко, то  $r_0$  практически лежит в инвариантном подпространстве небольшой размерности и в нем можно следующим образом приблизенно вычислить  $A^{-1}r_0$ .

Предположим, что известны итерированные невязки  $r_0, r_1, r_2, \dots, r_m$ , ( $A^k r_0 = r_k$ ); с их помощью образуют константы Шварца  $s_k = (r_j, r_{k-j})$ ,  $k = 0, 1, \dots, 2m-1$ , и строят соответствующую QD-схему. По этой схеме находят (см. § 4 главы I) многочлены  $p_m^{(v)}(z)$ , из которых нас особенно интересует  $p_m^{(0)}(z)$ ; он является в какой-то степени «приближенным характеристическим многочленом» матрицы  $A$  в упомянутом выше инвариантном подпространстве. Аналогично формуле (18) имеем тогда

$$x \sim x_m = x_0 + \frac{r_{m-1} + c_1 r_{m-2} + \dots + c_{m-2} r_1 + c_{m-1} r_0}{c_m}, \quad (19)$$

где

$$p_m^{(0)}(z) = z^m + c_1 z^{m-1} + c_2 z^{m-2} + \dots + c_{m-1} z + c_m.$$

Хотя изложенные здесь результаты и могут вызвать некоторое недоверие, однако мы хотим добавить, что этот метод математически эквивалентен  $Cg$ -алгоритму Штифеля — Хестенеса [3]. Именно, полученный таким образом из  $x_0$  вектор  $x_m$  совпадает с вектором  $x^m$ , полученным через  $m$  шагов с помощью  $Cg$ -алгоритма.

- [1] Aitken A. C., On Bernoulli's numerical solution of algebraic equations, *Proc. Roy. Soc., Edinburgh, Ser. A*, 46 (1925/26), 289–305.
- [2] Hadamard J., Essai sur l'étude des fonctions données par leur développement de Taylor, Thèse, Paris, 1892.
- [3] Hestenes M. R., Stiefel E., Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 49 (1952), 409–436.
- [4] Lanczos C., An Iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators, *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 45 (1950), 255–282.
- [5] Lanczos C., Proceedings of a second symposium on large scale calculating Machinery, 1949, p. 164–206.
- [6] Rutishauser H., Beiträge zur Kenntnis des Biorthogonalisierungsalgorithmus von C. Lanczos, *ZAMP*, 4 (1953), 35–36.
- [7] Stiefel E., Zur Berechnung höherer Eigenwerte symmetrischer Operatoren mit Hilfe der Schwarzschen Konstanten, *Z. angew. Math. Mech.*, 33 (1953), 260–262.
- [8] Wall H., Analytic theory of continued fractions, New York, 1948.
- [9] Shanks D., An analogy between transients and mathematical sequences and some nonlinear sequence-to-sequence transforms suggested by it, Naval Ordnance Laboratory Memorandum 9994 White Oak Md., 1949.
- [10] Shanks D., Nonlinear transformations of divergent and slowly convergent sequences, *J. Math. Phys.*, 34 (1955), 1–42.
- [11] Aitken A. C., Further numerical studies in algebraic equations and matrices, *Proc. roy. Soc. Edinb.*, 51 (1931), 80–90.
- [12] Rutishauser H., Eine Formel von Wronski und ihre Bedeutung für den Quotienten-Differenzen-Algorithmus, *ZAMP*, 7 (1956), 164–169.
- [13] Stiefel E., Kernel polynomials in linear algebra and their numerical applications, *Progr. Report Nat. Bur. Standards* (1955) April.
- [14] Whittaker E. T., Robinson G., Calculus of Observations, London, 1924.
- [15] Perron O., Die Lehre von den Kettenbrüchen, Leipzig, 2-е изд., стр. 524.
- [16] Гершгорин С. А., Über die Abgrenzung der Eigenwerte einer Matrix, Изв. АН СССР, ОФМН, 7 (1931), 749–754.
- [17] Zurmühl R., Praktische Mathematik, Berlin, 1953, 481.
- [18] Rutishauser H., Ein kontinuierliches analog zum Quotienten-Differenzen-Algorithmus, *Arch. Math.*, 5 (1954), 132–137.
- [19] Rutishauser H., Report on the solution of eigenvalue problems with the LR-Transformation, Institut für angewandte Mathematik der ETH, 1956, p. 51.
- [20] Rutishauser H., Bauer F. L., Détermination des vecteurs propres d'une matrice par une méthode itérative avec convergence quadratique, *C. R. Paris*, 240 (1955), 1680–1681.
- [21] Karush W., An iterative method for finding characteristic vectors of a symmetric matrix, *Pacif. J. Math.*, 1 (1951), 233–248.
- [22] Bauer F. L., Beiträge zur Entwicklung numerischer Verfahren für programmgesteuerte Rechenanlagen. II. Direkte Faktorisierung eines Polynoms, *Sitz.-Ber. bayr. Akad. Wiss.* (1956), 163–203.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие переводчика . . . . .	5
Введение . . . . .	7
<i>Глава I. Основные теоретические положения</i> . . . . .	9
§ 1. Постановка задачи . . . . .	9
§ 2. Алгоритм частных и разностей (QD-алгоритм) . . . . .	10
§ 3. Правила ромба . . . . .	13
§ 4. Многочлены $p_\sigma^{(v)}(z)$ . . . . .	14
§ 5. Связь с теорией непрерывных дробей . . . . .	17
§ 6. Трудности при образовании QD-схемы . . . . .	20
§ 7. Основные свойства QD-алгоритма . . . . .	21
§ 8. Связь с ВО-алгоритмом Ланцюша . . . . .	25
§ 9. Связь с cg-алгоритмом . . . . .	27
§ 10. Теорема сложения для непрерывных дробей . . . . .	28
<i>Глава II. Применение алгоритма частных и разностей</i> . . . . .	32
§ 1. Преобразование степенного ряда в непрерывную дробь . . . . .	32
§ 2. Суммирование плохо сходящихся рядов . . . . .	34
§ 3. Решение алгебраических уравнений . . . . .	36
§ 4. Прогрессивная форма QD-алгоритма . . . . .	37
§ 5. Решение алгебраических уравнений с помощью прогрессивной формы QD-алгоритма . . . . .	38
§ 6. Формулы Вронского . . . . .	41
§ 7. Нахождение комплексных корней . . . . .	43
§ 8. Квадратичная сходимость QD-алгоритма . . . . .	45
§ 9. Меры при делении на нуль . . . . .	52
§ 10. Интерполяция экспоненциальными суммами . . . . .	54
<i>Глава III. Определение собственных значений и собственных векторов матрицы с помощью QD-алгоритма</i> . . . . .	61
§ 1. Определение собственных значений . . . . .	61

§ 2. Задача нахождения собственных векторов . . . . .	62
§ 3. Рекуррентные формулы для $x_\sigma^{(2\mu)}, y_\sigma^{(2\mu)}$ . . . . .	66
§ 4. Способ вычисления собственных векторов с квадратичной сходимостью . . . . .	72
§ 5. Собственные значения и собственные векторы бесконечных симметрических матриц . . . . .	76
<i>Глава IV. Приложение</i> . . . . .	80
§ 1. LR-преобразование . . . . .	80
§ 2. Непрерывный аналог QD-алгоритма . . . . .	84
§ 3. QD-релаксация . . . . .	88