УДК 517.5

# СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВЫЧИСЛЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЧИСЛЕННЫМИ МЕТОДАМИ А.М. ДАНИЛЕВСКОГО И А.Н. КРЫЛОВА

Гибадатова Л.Р., Торшина О.А.

**Статья основана на обзоре численных методов применяемых для вычисления собственных значений дифференциальных операторов и их сравнительном анализе. Изучаются методы А.Н. Крылова и А.М. Данилевского, основанные на составлении характеристического уравнения, получение его коэффициентов и решении. В работе приведены вычисления собственных значений матрицы, а также исследуется двумерный квантовый ангармонический осциллятор с оператором гамильтониана, с целью отыскания его собственных значений и собственных векторов. Рассмотренные в работе численные методы, применяемые для нахождения чисел характеризующих спектр оператора, являются необходимым механизмом при решении задач возникающих при моделировании, проектировании или анализе различных технических систем. В механических и электрических системах собственные векторы описывают формы колебаний, а собственные числа соответствуют собственным частотам колебаний. В динамической теории и задачах, приводящих к система дифференциальных уравнений знание характеристик спектра дает возможномсть определить устойчива ли рассматриваемая система и дать характеристику поведения системы во времени. Собственные значения и собственные векторы матриц также используются при расчетах в строительных конструкциях для оценки величин критических нагрузок. Методы нахождения собственных значений является обязательным элементом математического моделирования.**

**Ключевые слова**: спектральная теория, дифференциальные операторы, собственные значения, собственные векторы, матрица, вековое уравнение, нормальный вид Фробениуса, определитель.

# A COMPARATIVE ANALYSIS OF THE CALCULATION OF THE SPECTRAL CHARACTERISTICS OF NUMERICAL METHODS OF A. M. DANILEVSKII AND A. N. KRYLOV

Gibadatova L.R., Torshina, O. A.

**The article is based on a review of the numerical methods used to calculate the eigenvalues of differential operators and their comparative analysis. The methods of A.N. Krylova and A.M. Danilevsky, based on the calculation of the coefficients of the characteristic equation and its subsequent solution. The paper presents calculations of the eigenvalues of the matrix, and also studies a two-dimensional quantum anharmonic oscillator with the Hamiltonian operator, in order to find its eigenvalues and eigenvectors. The numerical methods considered in work applied to calculation of spectral characteristics, they are the basic tool for the decision of computing problems connected with designing or the analysis of volume technical systems. In mechanical and electrical systems, eigenvectors describe oscillation shapes, and eigenvalues correspond to eigenfrequencies of vibrations. In the theory of dynamical systems and related systems of linear differential equations, knowledge of the eigenvalues makes it possible to determine whether the system in question is stable and to characterize the system behavior in time. Eigenvalues and eigenvectors of matrices are also used in calculations in building structures to estimate the values of critical loads. Methods for finding eigenvalues is an essential element of mathematical modeling.** **The article is based on a review of the numerical methods used to calculate the eigenvalues of differential operators and their comparative analysis. The methods of A.N. Krylova and A.M. Danilevsky, based on the calculation of the coefficients of the characteristic equation and its subsequent solution. The paper presents calculations of the eigenvalues of the matrix, and also studies a two-dimensional quantum anharmonic oscillator with the Hamiltonian operator, in order to find its eigenvalues and eigenvectors. The numerical methods considered in work applied to calculation of spectral characteristics, they are the basic tool for the decision of computing problems connected with designing or the analysis of volume technical systems. In mechanical and electrical systems, eigenvectors describe oscillation shapes, and eigenvalues correspond to eigenfrequencies of vibrations. In the theory of dynamical systems and related systems of linear differential equations, knowledge of the eigenvalues makes it possible to determine whether the system in question is stable and to characterize the system behavior in time. Eigenvalues and eigenvectors of matrices are also used in calculations in building structures to estimate the values of critical loads. Methods for finding eigenvalues is an essential element of mathematical modeling.**

**Keywords**: spectral theory, differential operator, own values, eigenvectors, matrix, secular equation, normal Frobenius species, determinant.

Значительную роль в общей спектральной теории (СТ) операторов играет СТ дифференциальных операторов (ДО), занимающая, и в математическом анализе 19-х и 20-х веков, и в приложениях к физическим задачам естественных наук, огромное место [11]. Самые первые упоминания о СТ замечены в 18-ом веке. Ее использовали в своих трудах о колебании струны Бернулли, Эйлер, а также Даламбер. Сами истоки СТ ДО уходят далеко в задачи математической физики, где рассматриваются собственные функции и собственные значения.

Лаплас и Лагранж первыми изучили численное нахождение корней, т.е. решений. Они же первыми успели рассказать о развитой форме векового уравнения и о способах его составления. Спустя время к ним присоединился Леверье – выдающийся астроном, и известный математик Якоби [7].

Ближе к середине 20-го века была рассмотрена новая последовательность выведения векового уравнения, Алексеем Николаевичем Крыловым. Как оказалось, для нового метода необходимо вычислений, в n-раз меньше, чем были нужны раньше, при вычислении изученными методами. При использовании последовательности можно заметить особые случаи. Их рассмотрели и вывели ученые Николай Николаевич Лузин и Игорь Николаевич Хлодовский. Но эти вспомогательные исследования не облегчили решения, потому что все их результаты считали корни данного уравнения известными [1].

При создании своего метода, ученый обнаружил интересную закономерность: не применяя аппарат дифференциальных уравнений, из обычной диагональной формы можно вывести вековое уравнение благодаря алгебраическим преобразованиям. Также свойства дифференциальных уравнений используются в методе, Алексея Николаевича Крылова, для получения векового уравнения [6].

Окончание тридцатых годов данного века характеризовалось предложением, А.М. Данилевского, способа нахождения собственных значений и собственных векторов. Он оказался более экономным, по сравнению с другими, в построении собственного многочлена матрицы. Метод состоит из получения нормального вида Фробениуса из векового определителя [2].

***Метод Александра Михайловича Данилевского.***

Изначально получают нормальный вид Фробениуса из векового определителя:

$$D(\lambda) = \begin{vmatrix} p_1 - \lambda & p_2 & p_3 \dots p_n \\ 1 & -\lambda & 0 \dots 0 \\ 0 & 1 & -\lambda \dots 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 \dots -\lambda \end{vmatrix}$$

Формула разложения векового определителя по элементам первой строки выглядит так:

$$D(\lambda) = (-1)^n(\lambda^n - p_1\lambda^{n-1} - p_2\lambda^{n-2} - \dots - p_n)$$

Далее определяют матрицу *P,* схожею матрице *A,* в форме Фробениуса, так как собственные числа симметричны относительно операции подобия.

При этом вычисление начинается с последней строки искомой матрицы, которое последовательно изменяет ее строки и приводит к форме Фробениуса. В конце концов, должны получиться, при этом преобразовании, подобные матрицы.

Начальные действия, приведения *n*-ой строки искомой матрицы *A* к виду, который необходим, распишем подробнее. Производим замену матрицы *A* в матрицу *B,* по формулам:

$$b_{ij} = \frac{a_{ij} - a_{i\,n-1} a_{n\,i}}{a_{n\,n-1}}, \text{ при i=1,…,n; j не равно n-1;}$$

$$b_{i\,n-1} = \frac{a_{i\;n-1}}{a_{n\,n-1}}, \text{ при i=1,…,n.}$$

Конечная строчка вычисленной матрицы *B* совпадает в начальными параметрами, но не подобна матрице *A*. Тогда просто необходимо подобрать матрицу *C,* схожую *A*. И у нее последняя строка должна быть такой же:

$$c_{ij} = b_{ij} \text{ , при i=1,..,n-2;}$$

$$c_{n-1\,j} = a_{n\,1} b_{1\,j} + a_{n\,2} b_{2\,j} + \ldots + a_{n\,n} b_{n\,j} \text{ , при j=1,…,n.}$$

Завершается вычисление, получением матрицы *C*, подобной матрице *A*. У которой последняя строка совпадает со строкой матрицы приведенного вида Фробениуса, предложенной в примере. Если продолжить вычисления, изменяя аналогично *n-1* строку матрицы *C* и т.д., а также предполагая преобразование матрицы *A* в матрицу Фробениуса *P*, то, в результате, получим матрицу вида:

$$D = \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & \ldots & d_{1k} & \ldots & d_{1n-1} & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} & \ldots & d_{2k} & \ldots & d_{2n-1} & d_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ d_{k1} & d_{k2} & \ldots & d_{kk} & \ldots & d_{kn-1} & d_{kn} \\ 0 & 0 & \ldots & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & \ldots & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

Из матрицы мы узнали, что $d_{k\,k-1} = 0$. А значит, дальнейшие действия, методом Данилевского, не допустимы. В подобных ситуациях существуют два выхода. Первый случай выглядит так: если $\exists\, d_k \neq 0$, где $i < k - 1$, тогда меняем местами *(k-1)* и *i* столбцы, и *(k-1)* и *i* строки. Получаем матрицу, похожую на *D.* Для полученной матрицы можно использовать метод Данилевского, продолжив дальнейшие преобразования.

Все элементы *k* строчки равны 0, то есть матрица:

$$D = \begin{vmatrix} D_1 & L \\ 0 & D_2 \end{vmatrix}$$

В этой матрице $D_2$ имеет нормальный вид Фробениуса, а матрица $D_1$ приводится к нему методом Данилевского. Многочленом, полученным порождением собственных значений

матрицы $A$, называется произведение многочленов $D_1$и $D_2$. Где коэффициенты $D_2$ известны. Тогда на вход поступает матрица $A$. На выход матрица $C$ нормального вида Фробениуса, подобная $A$.

Второй случай, когда дальнейшие действия невозможны, основан на применении переменной $S$ ($S$ количество строк в матрице $D_1$).

Причем когда:

- $S=0$, тогда процесс успешно отработал;
- $S>0$, тогда на некотором шаге возник случай описанный выше.

***Метод Алексея Николаевича Крылова.***

Метод Крылова полностью противоположен методу Данилевского, и идея у Крылова совершенно другая [5]. Конечно, в методе Данилевского число арифметических операций намного меньше, но в методе Крылова, результат развертывания определителей выше 6-го порядка более точный. Данный способ также содержит особые случаи [4].

Нахождение собственных чисел.

Выбирается произвольный столбец $y^0$. Далее выполняется умножение. Характеристический многочлен матрицы А, слева тождественно равный 0 (по Th Гамильтона-Кели) с матрицей А в качестве аргумента.

Получаем: $A^n y^0 + p_1 A^{n-1} y^0 + \cdots + p_n y^0$=0. Рассмотрим $y^i = A^i y^0$, $p = (p_1 \dots p_n)^x$, тогда

$$(y^{n-1} y^{n-2} \dots y^0) p = -y^n. \qquad (1)$$

Полученная система имеет хотя бы одно решение [8]. Когда коэффициенты характеристического уравнения известны, тогда решение одно [3]. А когда решений два или больше, т.е. не единственность эквивалента линейной зависимости $y^{n-1}, \dots, y^0$, тогда возможны два случая решений.

*Первый метод.*

Выбирается другой столбец $y^0$. Когда с характеристическим многочленом не совпадает минимальный полином матрицы, тогда есть первоначальный вектор, порождающий последовательность $n$ линейно-независимых векторов.

*Второй метод* легче применяется, хотя он и логически сложнее, но в большинстве случаях решает задачи. В методе Гаусса решения системы (1) $r$ является рангом ее матрицы. Также можем показать, что последовательность $y^0, \dots, y^{r-1}$ - линейно-независима, а $y^r$ линейно выражается через них.

Решение системы

$$(y^{r-1}, \dots, y^0)S_r = -y^r, S_r = \begin{pmatrix} s_1 \\ \vdots \\ s_r \end{pmatrix} \quad (2)$$

исключительно и минимальный аннулятор вектор - столбца $y^0$ является столбцом. А этот столбец является коэффициентами делителя характеристического полинома. Значительное облегчение нахождения корней дает понижение степени. Полученные корни делителя полностью соответствуют корням делимого.

Из решения системы (1) методом Гаусса можно вывести большое количество информации решения системы. Когда треугольный вид получают преобразованием справа, тогда изначально получают нули в крайнем с права столбце, затем во втором с права и т.д. В процессе решения системы (1) выявляется ранг матрицы равный *r*. Дойдя до *n-r* –го столбца, получим, что все соответствующие элементы на соответствующих позициях равны нулю. Составим систему, равносильную системе (2), но уже с треугольной матрицей. Для этого отбрасываем первые *n-r* столбцы в матрице коэффициентов, на место правой части пишем *n-r*-й столбец с обратным знаком. Нулевые строки можно вычеркнуть.

Вычислив систему (2), нужно брать другой $y^0$ за начальный столбец и повторить процесс. Возьмем ранг новой системы (1) равный *r*. Наибольший общий делитель (НОД) у данных делителей полинома может оказаться отличным от 0. После того, как найдено НОД разделим на него исходные полиномы. В результате получилась задача нахождения корней у 3х многочленов степеней $\bar{\bar{r}}, r - \bar{\bar{r}}, \bar{r} - \bar{\bar{r}}$. За счет понижения степени, значительно облегчается поиск корней характеристического уравнения, даже если и получены три многочлена вместо одного [9]. У 2х полиномов должны быть общие корни и НОД степени $\bar{\bar{r}} \geq r + \bar{r} - n$ тогда, когда $r + \bar{r} > n$.

<u>Нахождение собственных векторов</u> [10].

Когда известны $n$ разных собственных чисел, тогда процесс облегчается. Базис состоит из собственных векторов.

Справедливо разложение:

$$y^0 = \sum_{i-1}^{n} c_i x_i, \quad (3)$$

где $x_i$- собственный столбец для собственного числа $\lambda_i$; $c_i$- число.

Получаем равенства вида:

$$y^1 = \sum_i c_i \lambda_i x_i,$$

……..

$$y^{n-1} = \sum_i c_i \lambda_i^{n-1} x_i$$

поочередным умножением (3) слева на матрицу А.

Умножим эти равенства соответственно на $q_{n-1}, \dots, q_1$ и сложим:

$$y^{n-1} + q_1 y^{n-2} + \dots + q_{n-1} y^0 = c_1 \varphi(\lambda_1) x_1 + c_2 \varphi(\lambda_2) x_2 + \dots + c_n \varphi(\lambda_n) x_n, \qquad (4)$$

где $\varphi(\lambda) = \lambda^{n-1} + q_1 \lambda^{n-2} + \dots + q_{n-1}$.

В том случае, если в левой части равенства (4) $x_i$ - собственный столбец для собственного числа $\lambda_i$, с точностью до числового множителя, тогда $c_i \neq 0$. Коэффициенты $q_i$, $i = \overline{1, n-1}$, с легкостью могут быть определены по схеме Горнера $\begin{cases} q_1 = \lambda_i + p_1 \\ q_i = \lambda_1 q_{i-1} + p_i, \end{cases}$ $j > 1$.

Рассмотрим двумерный квантовый ангармонический осциллятор с оператором гамильтониана. Для двумерного ангармонического осциллятора оператор гамильтониана запишем в следующем виде:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}x^2 + \hat{p}y^2}{2m} + \frac{mw^2(x^2 + y^2)}{2} + a(x^4 + y^4) + b(x^6 + y^6) + cxy,$$

где $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$, $m$ −масса осциллятора, $w$ −угловая частота.

Потенциал находится по формуле:

$$V(\zeta) = \frac{mw^2}{2}\zeta^2 + a\zeta^4 + b\zeta^6,$$

в полном виде потенциал выглядит так:

$$V(x, y) = V(x) + V(y) + cxy,$$

Взяв для примера, $m = 1, w = 1, a = 1,\ b = 0.5,\ c = 5,$ и за начальное приближение выберем волновую функцию гармонического осциллятора основного состояния:

$$\psi_0 = e^{-2x^2};\ \psi(x, y) = \psi_0(x)\psi_0(y)$$

Оператор гамильтониана, приведенный в виде матрицы для вычисления собственных значений и собственных векторов по методам Данилевского и Крылова, записывается в матричной форме размером [5×5]:

$$\begin{bmatrix} 2.341797 & 1.577077 & 0 & 0 & 0 \\ 1.577077 & 7.799269 & 3.898666 & 0 & 0 \\ 0 & 3.898666 & 14.921037 & 11.039537 & 0 \\ 0 & 0 & 11.039537 & 79.169258 & 59.757082 \\ 0 & 0 & 0 & 59.757082 & 173.91037 \end{bmatrix}$$

Записав матрицу, вычисляются собственные значения данной матрицы и фиксируются в таблице №1. Выбрав, полученные по методу Данилевского собственные значения за $\widetilde{\lambda_i}$, а по методу Крылова - за $\hat{\lambda}_i$. Как мы и раньше знали, с одним собственным числом согласуется лишь один собственный вектор. Дальше находим собственные векторы, распределяем их и записываем в таблицу №2. В третий столбец таблицы записывается результат оценки разницы отклонения рассмотренных методов друг от друга.

Найденные по методу Данилевского векторы берем за $\tilde{x}$, а по методу Крылова - за $\hat{x}$.

Таблица №1. Собственные значения матрицы.

| $i$ | $\widetilde{\lambda}_i$, | $\widehat{\lambda}_i$ | $\lvert\widetilde{\lambda}_i - \widehat{\lambda}_i\rvert$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 1.802471 | 1.802482 | 0.000011 |
| 2 | 6,207166 | 6,207098 | 0.000068 |
| 3 | 14,316396 | 14,316492 | 0.000094 |
| 4 | 51,878532 | 51,878411 | 0,000121 |
| 5 | 201,81837 | 201,81839 | 0,00002 |

Таблица №2. Собственные векторы матрицы.

| $\lambda_i$ | $\widetilde{x}$ | $\widehat{x}$ | $\lvert\widetilde{x} - \widehat{x}\rvert$ |
|---|---|---|---|
| $\lambda_1$ | 0,939722 | 0,939721 | 0,000001 |
| | -0,321418 | -0,321418 | 0 |
| | 0,114269 | 0,114270 | 0,000001 |
| | -0,022280 | -0,022280 | 0 |
| | 0,007736 | 0,007736 | 0 |
| $\lambda_2$ | -0,335532 | -0,335532 | 0 |
| | -0,801075 | -0,801088 | 0,000013 |
| | 0,483430 | 0,483433 | 0,000003 |
| | -0,103064 | -0,103064 | 0 |
| | 0,036702 | 0,036703 | 0,000001 |
| $\lambda_3$ | 0,065892 | 0,065891 | 0,000001 |
| | 0,504431 | 0,504444 | 0,000013 |
| | 0,829429 | 0.829412 | 0,000017 |
| | -0,216132 | -0,216129 | 0,000003 |
| | 0,080977 | 0,080976 | 0,000001 |
| $\lambda_4$ | -0,000688 | -0,000686 | 0,000002 |
| | -0,022042 | -0,022008 | 0.000034 |
| | -0,254270 | -0,254268 | 0,000002 |
| | -0,866938 | -0,866941 | 0,000003 |
| | 0,428105 | 0,428107 | 0,000002 |
| $\lambda_5$ | 0,0000609 | 0,0000612 | 0.000003 |
| | 0,000550 | 0,000531 | 0,000019 |

| | | | |
|---|---|---|---|
| | 0,025644 | 0,025646 | 0,000002 |
| | 0,436552 | 0,436555 | 0,000003 |
| | 0,899301 | 0,899309 | 0,000008 |

Сочетание метода Данилевского и метода Крылова ярко отражается в заполненных таблицах. Сравнивая число операций затраченных для расчетов, мы получаем, что метод Данилевского быстрее метода Крылова.

**Литература**


1. Березин И.С., Жидков Н.П. Методы вычислений. Москва, 2015. 620 с.
2. Долгополов Д.В. Методы нахождения собственных значений и собственных векторов матриц. Санкт-Петербург. 2015. 220 с.
3. Дубровский В.В., Торшина О.А. Формула первого резуляризованного следа для дифференциального оператора Лапласа – Бельтрами // Дифференциальные уравнения и их применение. 2002. № 1. С. 9-19.
4. Кадченко С.И., Торшина О.А. Вычисление собственных чисел эллиптических дифференциальных операторов с помощью теории регуляризованных рядов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математика. Механика. Физика. 2016. Т. 8. № 2. С. 36-43.
5. Кадченко С.И., Торшина О.А., Рязанова Л.С. Вычисление собственных чисел спектральной задачи Ора – Зоммерфельда // Современные наукоемкие технологии. – 2018. № 8. С. 89-94.
6. Козин Р.Г. Алгоритмы численных методов линейной алгебры и их программная реализация. Москва. 2012. 124 с.
7. Копачевский Н.Д. Спектральная теория операторных пучков: Специальный курс лекций. Симферополь: ООО ФОРМА. 2009. 128 с.
8. Круликовский Н.Н. Пути развития спектральной теории обыкновенных дифференциальных операторов. Томск. 2008. 222 с.
9. Михеев С. Е. Многомерная аппроксимация и интерполяция. С.-Петерб. 2012. 59 с.
10. Михеев С.Е. Численные методы. СПб.: СПбГУ. 2013. 93 с
11. Торшина О.А. Существенный спектр задачи Неймана для оператора Лапласа // Современные проблемы науки и образования: материалы L внутривузовской научной конференции преподавателей МаГУ. – Магнитогорск: Издательство Магнитогорский государственный университет, 2012. - С. 271.