

MATHEMATISCHES FORSCHUNGSINSTITUT OBERWOLFACH

T a g u n g s b e r i c h t 10/1990

Eigenwertaufgaben in den Natur- und Ingenieurwissenschaften  
und ihre numerische Behandlung

25. 2. - 3. 3. 1990

Die Tagung, die unter der Leitung der Herren J. Albrecht (Clausthal-Zellerfeld), L. Collatz (Hamburg), P. Hagedorn (Darmstadt) und W. Velte (Würzburg) stand, hatte ein breites Spektrum von Themen zum Gegenstand.

Eine erste Gruppe von Vorträgen befaßte sich mit qualitativen Untersuchungen bei Eigenwertaufgaben sowie mit Methoden zur Gewinnung von Eigenwertschranken, einschließlich der Besonderheiten dieser Methoden hinsichtlich ihrer Effektivität.

In einer weiteren Gruppe von Vorträgen wurde über Eigenwertaufgaben verschiedenster Herkunft berichtet, darunter über Eigenwertaufgaben im Zusammenhang mit der Methode der finiten Elemente und dem Studium von Ecken- bzw. Kantensingularitäten bei Lösungen partieller Differentialgleichungssysteme, ferner etwa über Eigenwertbedingungen bei ARMA-Modellen, sowie nicht zuletzt über eine ganze Reihe konkreter Eigenwertaufgaben aus den Ingenieurwissenschaften und der Quantenchemie.

Ein dritter, ausgedehnter Themenkreis war der Numerik bei algebraischen Eigenwertaufgaben mit sehr großen (insbesondere dünn besetzten) Matrizen gewidmet, wie sie durch Diskretisierung von

Eigenwertaufgaben bei partiellen Differentialgleichungen entstehen. Zur Sprache kamen u. a. Methoden der Vorkonditionierung, neue Varianten iterativer Verfahren sowie auch parallele Algorithmen.

Die relativ große Spannweite der Themen ermöglichte es den Teilnehmern, sich über neue Entwicklungen außerhalb des engeren, eigenen Arbeitsgebietes zu unterrichten, was von den Teilnehmern einhellig sehr positiv bewertet wurde.

Es ist ein Tagungsband in der Reihe ISNM des Birkhäuser-Verlags vorgesehen.

## Vortragsauszüge

J. ALBRECHT:

### Einschließung von Eigenwerten bei der Stokes'schen Eigenwertaufgabe

Die Stokes'sche Eigenwertaufgabe lautet:

"Gesucht  $\lambda \in \mathbb{R}^+$ ,  $\phi \in V$  so, daß  $M(f, \phi) = \lambda N(f, \phi)$  für alle  $f \in V$ ";  
dabei ist

$$V := \{f \in [W_2^{(1)}(\Omega)]^3 : \operatorname{div} f = 0 \text{ in } \Omega, f = 0 \text{ auf } \partial\Omega\},$$

$$M(f, g) := \int_{\Omega} \operatorname{rot} f \cdot \operatorname{rot} g \, d\Omega \text{ für } f, g \in V,$$

$$N(f, g) := \int_{\Omega} f \cdot g \, d\Omega \text{ für } f, g \in V.$$

Zunächst werden - für quaderförmige Gebiete  $\Omega$  - die Symmetrieklassen angegeben, denen die Eigenvektoren  $\phi$  angehören. Nach dem Verfahren von Ritz werden dann obere Schranken und nach dem Verfahren von Goerisch untere Schranken für die ersten Eigenwerte berechnet, und zwar mit Ansatzvektoren, die ebenfalls zu diesen Symmetrieklassen gehören.

Für  $\Omega = (-\pi/2, \pi/2)^3$  wurde folgende Einschließung des kleinsten Eigenwertes erzielt:

$$6.299 \, 39 \leq \lambda_1 \leq 6.299 \, 54.$$

G. ALEFELD:

### Ein Einschließungsverfahren mit höherer Konvergenzordnung - Anwendungen auf das algebraische Eigenwertproblem

Eine neue Klasse von Einschließungsverfahren für die Lösungen einer Gleichung mit einer Unbekannten mit höherer Konvergenzordnung (G. Alefeld, F. Potra, Computing 42, 69 - 80, 1989) wird auf Systeme übertragen. Anwendungen, insbesondere auf das algebraische Eigenwertproblem, werden diskutiert.

J. BARANGER / H. EL AMRI:

A numerical method for a spectral problem in singular perturbation

We consider a problem suggested by a model for a vibrating constrained bar with small flexural rigidity. This leads to a spectral problem for a singularly perturbed differential operator of the elliptic-elliptic type.

For the numerical approximation of this problem we propose to use an asymptotic expansion (AE) in which all the terms are approximated by a finite element method (FEM). We give the numerical analysis of this (AE-FEM) method and some numerical results.

C. BEATTIE:

How long does it take to trap an eigenvalue?

In the determination of inclusion intervals for eigenvalues reflecting high relative accuracy, one often observes that the determination of accurate upper bounds is substantially easier than the determination of lower bounds with comparable accuracy. We explore the extent to which this situation might be improved for lower bound estimation, focussing on the method of intermediate problems and the eigenvector-free formulation of Goerisch. Known convergence rate results for intermediate problems have been broadened to include a much wider class of problems of interest in quantum mechanics. Analogous results can be constructed in the eigenvector-free setting, producing the first convergence results for these methods.

H. BEHNKE:

Bounds for Eigenvalues with the Use of Interval Arithmetic

Two procedures for calculating bounds to eigenvalues of general matrix eigenvalue problems  $Ax = \lambda Bx$ ,  $A = A^T$ ,  $B = B^T$ ,  $B$  positive definite, are proposed. The first procedure is based on Temple

quotients and a theorem of Lehmann, the second is based on a generalization of Temple's and Lehmann's theorems by Goerisch. Numerical examples illustrate the fact, that bounds for multiple or clustered eigenvalues can be calculated as well.

L. BITTNER:

### Eigenwertbedingungen in der Theorie der ARMA-Modelle

Gegenwärtig werden in manchen Gebieten der Praxis sogenannte AR-, ARMA- u. a. Modelle zur Beschreibung des unbekanntem Zusammenhangs zwischen den Zustands-, Steuer- und Störvektoren  $x_k$ ,  $u_k$ ,  $z_k$  (zur Zeit  $t_k$ ) verwendet. Das sind Differenzgleichungen des Typs

$$x_k = \sum_{i=1}^p A_i x_{k-i} + z_k + \sum_{i=1}^q B_i z_{k-i} + \sum_{i=0}^r C_i u_{k-i} \quad (k_0 \leq k \leq k_1).$$

Verschiedene Fragestellungen führen auf das Problem der Lokalisierung der Determinantennullstellen von Polynommatrizen, z. B. auf die Frage, ob sämtliche Nullstellen von  $\det(I - \sum \lambda^i A_i) = 0$  außerhalb des Einheitskreises liegen, damit sich die Stationarität der stochastischen Folge  $(z_k)$  auf die Zustandsfolge  $(x_k)$  überträgt. Die Matrizen  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C_i$  sind von vornherein nicht bekannt, sondern müssen durch Schätzmethoden aus den Meßwerten  $\hat{x}_k$ ,  $\hat{u}_k$  errechnet werden. Im Vortrag wird gerade auf die Ausnutzung voraufgehender Rechenergebnisse hingewiesen.

E. BROMMUNDT:

### Natural oscillations of a rigid wheel rolling on a flexible rail

The (linearized) variational equations of the problem lead to the following 'two stage' eigenvalue problem (parameter  $\lambda$ ) for (\*) the rail, (\*\*) the wheel, a body and their coupling with the rail:

(\*)  $\underline{A}(\lambda, \kappa) \underline{x} = \underline{0}$ , where the  $8 \times 8$  matrix  $\underline{A}$  is a polynomial with respect to  $\lambda$  (order 4) and  $\kappa$  (order 8). For an assumed numerical value  $\lambda$ , (\*) is solved numerically:  $\underline{x} = \sum_{i=1}^8 c_i \hat{x}_i =: \hat{\underline{x}} \underline{c}$ .

(\*\*) 
$$\begin{bmatrix} \underline{B}_{11}(\lambda)\hat{\underline{X}} & \underline{B}_{12}(\lambda) \\ \underline{B}_{21}(\lambda)\hat{\underline{X}} & \underline{B}_{22}(\lambda) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \underline{c} \\ \underline{y} \end{pmatrix} = \underline{0}$$
, where  $\underline{B}_{22}$  is a  $7 \times 7$  matrix and the columns  $\underline{B}_{k1}\hat{\underline{X}}_i$  of the  $8 \times 8$  matrix  $\underline{B}_{11}\hat{\underline{X}}$  and of  $\underline{B}_{21}\hat{\underline{X}}$  depend explicitly on the  $\kappa_i(\lambda)$  from (\*).

The numerical evaluation of  $\Delta(\lambda) := \det(\dots) = 0$  via Newton's method leads to the eight eigenvalues  $\lambda_k$  of the discrete part of the spectrum. - There are parameter regions such that  $\text{Re } \lambda_{7/8} > 0$ : The stationary motion of the wheel may become unstable, self-excitation will occur.

F. CHATELIN:

#### Large scale non symmetric eigenproblems in practice

We present an algorithm (and prototype software) to compute a few eigenvalues of largest (or smallest) real part of a large sparse real non symmetric matrix. Such problems arise in stability analysis in all areas of Science (Markov chains, Brusselator, Navier-Stokes, composite materials etc. ...). The algorithm is based on Arnoldi's method and Tchebycheff iteration. It treats the case of a multiple defective eigenvalue (application in composite materials).

L. COLLATZ:

#### Rationale Approximation bei der Einschließung von Eigenwerten (Ein kurzer Überblick)

Bei Gegenüberstellung der Polynom-Approximation (kurz PA) und der rationalen Approximation (kurz RA) ist die RA im allgemeinen in der Durchführung viel aufwendiger als die PA; die RA hat aber mancherlei Vorzüge vor der PA; z. B. zeigt die Padé-Tafel für die RA oft eine bessere Annäherung [bei der Tschebyscheffschen Approximation] an, und bei vielen Problemklassen versagt die PA ganz, z. B. bei unbeschränkten Gebieten oder bei im Endlichen auftretenden Polen und anderen Singularitäten, wofür Aussenraumauf-

gaben und Unendlichkeitsstellen der Lösungen Beispiele geben. Die Theorie der H-sets (H-Mengen), die auch bei nichtlinearen Approximationen und bei mehreren unabhängigen Veränderlichen Anwendung findet, beschäftigt sich mit der Einschließung der "Minimalabweichung"  $\rho$  und dem Best-Erreichbaren. Bei Eigenwertaufgaben tritt RA oft bei Anwendung des "Quotienten-Einschließungssatzes" auf. Es werden Klassen von Problemen angegeben, bei denen Schranken für sämtliche Eigenwerte mit gleichem relativen Fehler, auch für die höheren Eigenwerte, leicht erhältlich sind. Verschiedene Zahlenbeispiele werden genannt.

#### I. ELISHAKOFF:

##### Some Questions Arising in Engineering Eigenvalue Analysis

Number of eigenvalue problems, arising in engineering, are considered.

- 1) In studying the response of mechanical systems due to stochastic excitations the normal mode method is used. This method uses the information on the eigenvalues and eigenfunctions of the system in vacuo. The response becomes enhanced if there is an interaction of the modes corresponding to multiple eigenvalues. It could be easily shown that the square plates, simply supported at all edges, exhibit many multiple eigenvalues, such as  $\omega_{\alpha\beta} = \omega_{\beta\alpha}$  or with triple, quadruple etc. multiplicities. The question is posed on the possibility of multiple eigenvalues occurring in the all round clamped plates.
- 2) In composite plates there is a necessity to construct a theory which takes into account the shear deformation and rotary inertia and satisfies the requirements on the bounding surfaces. Here such a theory is developed. The mass and stiffness matrices, arising in this new theory turn out to be non-symmetric. The question arises if these are symmetrizable.
- 3) In order to describe a nondestructive testing evaluation of the buckling loads, a simple model is presented which

describes the small vibrations around a nonlinear state. It turns out that the vibrational frequencies are sensitive to initial imperfections.

L. ELSNER / A. BUNSE-GERSTNER:

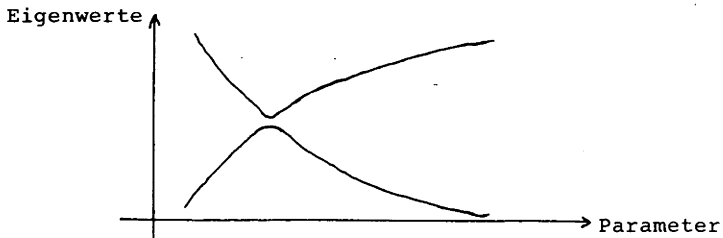
A QZ-like Algorithm for Unitary Matrix Pencils

Let  $U - \lambda V$  be an  $n \times n$  pencil with unitary matrices  $U$  and  $V$ . An algorithm is presented which reduces  $U$  and  $V$  simultaneously to unitary block diagonal matrices  $G_o = Q^H U P$  and  $G_e = Q^H V P$  with block size at most two. It is an  $O(n^3)$  process using Householder eliminations and it is backward stable. In the special case  $V = I$  the block diagonal matrices  $G_o, G_e$  can be normalized such that their entries are just the Schur parameters of the Hessenberg condensed form of  $U$ . We call  $G_o - \lambda G_e$  a Schur parameter pencil. It can also be derived from  $U, V$  by a Lanczos-like process. For the solution of the eigenvalue problem for  $G_o - \lambda G_e$  a QZ-type algorithm is developed based on the unitary reduction to Schur parameter form, which preserves this condensed form throughout the process. Each iteration step needs only  $O(n)$  operations. This method of solving the unitary eigenvalue problem seems to be the closest possible analogy to the QR method for the Hermitian eigenvalue problem.

F. GOERISCH:

Das Ausweichen von Eigenwertkurven bei parameterabhängigen Eigenwertaufgaben

Trägt man bei parameterabhängigen Eigenwertaufgaben die Eigenwerte  $\lambda_i$  gegen den Parameter auf, so erhält man häufig das folgende Bild:





Liegt darüber hinaus ein gewisses Verhalten der Eigenelemente vor, so spricht man vom Ausweichen der Eigenwertkurven ("curve veering"). Im ersten Teil des Vortrags wird ein Vorgehen geschildert, das bei nicht geschlossen lösbaren Aufgaben den Nachweis ermöglicht, daß das Kurvenausweichphänomen vorliegt; dieses Vorgehen wird an Hand einer Eigenwertaufgabe mit einem System partieller Differentialgleichungen, das bei der Beschreibung der thermischen Konvektion auftritt, erläutert. Im zweiten Teil des Vortrags wird eine Möglichkeit besprochen, parameterabhängige Eigenwertaufgaben durch einige charakteristische Größen zu beschreiben. Es wird diskutiert, inwieweit dies zu einem besseren Verständnis des Kurvenausweichphänomens beiträgt und wie dies bei nicht geschlossen lösbaren Aufgaben praktisch durchzuführen ist. Die Überlegungen werden an Hand der Stokesschen Eigenwertaufgabe auf einem quaderförmigen Gebiet erläutert.

K. HELFRICH:

Diskussion von vier vermiedenen Termkreuzungen bei den quantenmechanischen Zweizentren-Problemen  $BH^{5+}$  und  $LiH^{3+}$  mittels Diabatisierungsverfahren

Vermiedene Kreuzungen von Kurven gleichen räumlichen Symmetrietyps sind beim quantenmechanischen Zweizentren-Coulomb-Problem  $(-\Delta/2 - z_a/r_a - z_b/r_b)\chi = E\chi$  selten, da dieses wegen der Separabilität in elliptischen Koordinaten eine höhere als die räumliche Symmetrie hat und infolgedessen die Wignersche non crossing rule nur in modifizierter Form gilt. Bei  $BH^{5+}$  existiert eine vermiedene Kreuzung der Terme  $4f\sigma$  und  $5g\sigma$ . Bei  $LiH^{3+}$  sind es gleich drei Kurvenpaare, die sich fast kreuzen.

Diabatisierungsverfahren (ursprünglich konzipiert als Hilfsmittel zur bequemeren Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung für Stöße) erlauben es, solche vermiedenen Kreuzungen zu studieren. Ein Diabatisierungsverfahren ist eine Vorschrift, die jedem Wert des Kernabstands  $R$  eine unitäre Matrix  $U(R)$  zuordnet. In der Regel sind es nur zwei Termkurven, die sich nahekommen, und die

zugehörigen adiabatischen Funktionen  $\chi_i$  sind reell. Dann entarten die Matrizen  $U(R)$  zu zweidimensionalen Matrizen, parametrisiert durch einen Drehwinkel  $\alpha$ . Wenn man die Matrix  $U^+$  auf die Spalte der adiabatischen Funktionen anwendet, erhält man die Spalte der quasidiabatischen Funktionen. In dieser neuen orthogonalen Basis ist der Hamiltonoperator nicht mehr diagonal.

Vorgestellt werden das Verfahren von Meyer und Werner sowie das neuere Verfahren von Spiegelmann und Malrieu. Bei letzterem benötigt man Vorkenntnisse in Gestalt eines Modells, das Referenzzustände liefert. Zum Schluß erhält man ein Maß für die Güte des Modells.

R. HETTICH:

A comparison of two approaches to compute membrane eigenvalues by defect minimization

We consider the problem  $\Delta u + \lambda u = 0$  in some  $R \subset \mathbb{R}^2$ ,  $u = 0$  on the boundary. For arbitrary pairs  $(\lambda, u)$  "defects"  $\|\Delta u + \lambda u\|_R$ ,  $\|u\|_\Gamma$  can be computed. Defect minimization methods are based on theorems which by means of these defects give bounds  $\delta(\lambda, u)$  for the error in  $\lambda$  w.r.t an eigenvalue  $\lambda_k$  of the problem. To get good bounds a function space  $V_n(\lambda)$  ( $\dim V_n = n$ ) is chosen and  $\epsilon(\lambda) = \min_{u \in V_n(\lambda)} \delta(u, \lambda)$ ,

an optimized bound is computed. The local minima of  $\epsilon(\lambda)$  are approximations to eigenvalues with bound  $\epsilon(\lambda)$ . In the first method functions  $(V_n(\lambda))$  are used such that  $\Delta u + \lambda u = 0$  holds and, moreover, singularities in evtl. corners of  $R$  are "smoothed". For polygonal regions, in that way, any prescribed rate  $C/n^\sigma$  for the convergence of  $\epsilon(\tilde{\lambda}_k^{(n)})$  ( $n \rightarrow \infty$ ) can be realized. This is compared to the approach that  $V_n(\lambda) = V_n$ , a fixed space of (for instance) polynomials. Results for the rhombus are given, which show that known singularities should be taken into account.

T. HUCKLE:

Computing the Minimum Eigenvalue of a symmetric positive definite matrix with the Spectral Transformation Lanczos method

We introduce a combination of Rayleigh Quotient Iteration, Inverse Iteration and Lanczos method, similar to the spectral Transformation Lanczos method of Ericsson and Ruhe. The algorithm is shown to converge ultimately cubically to the minimum eigenvalue of a symmetric matrix using only positive definite linear equations. The method can also be applied to the problem of finding the eigenvalue nearest to a given real  $r$ , and to the general symmetric eigenvalue problem.

R. VAN KEER / M. VANMAELE:

Convergence and error estimates for a finite element method with numerical quadrature for a second order elliptic eigenvalue problem

This paper deals with the convergence and error estimates for the approximate eigenvalues and eigenfunctions of a 2nd order linear elliptic eigenvalue problem on a rectangular domain  $\Omega$ . The eigenpairs are obtained by a finite element method with a rectangular mesh of degree  $k \geq 1$  in each variable, using suitable numerical quadrature formulas for both the bilinear form and the  $L_2(\Omega)$ -inner-product. The latter approximation is chosen so as to result in a lumped mass matrix. Special attention is paid to the case of multiple exact eigenvalues, adapting some ideas of Dautray-Lions' approach to the consistent mass approximation. The work extends recent results of Andreev, Andreev and Lazarov, Andreev et al., where only the lumping of the mass is considered and only single exact eigenvalues are taken into account. No use is made of Kato's perturbation theory for compact, selfadjoint operators as in Fix's investigation.

P. KLEIN:

Zur numerischen Behandlung nichtselbstadjungierter Plattenschwingungsprobleme

Es werden zwei nichtselbstadjungierte Plattenschwingungsprobleme behandelt, die auf H. LEIPHOLZ zurückgehen. Nach Abtrennen der Zeitabhängigkeit haben beide Probleme die Form:

$$\alpha \Delta^2 w + \mu K w = \lambda p w \text{ in } \Omega = (0, a) \times (0, b) \subset \mathbb{R}^2$$

mit Randbedingungen für  $w$ . Der Operator  $K$  ist auf der Menge der die Randbedingungen erfüllenden Funktionen formal nichtselbstadjungiert;  $\alpha$  (Plattensteifigkeit),  $\mu$  (Last) und  $p$  (Massendichte) sind konstant. Bei festem  $\alpha$ ,  $p$  und  $b$  wird die Abhängigkeit des Realteils des Eigenwerts  $\lambda$  von den Parametern  $a$  und  $\mu$  untersucht. Für jedes der betrachteten Probleme wird in der  $(a, \mu)$ -Ebene ein Bereich angegeben, wo für alle Eigenwerte  $\lambda$   $\operatorname{Re} \lambda \geq 0$  gilt, und es wird ein anderer Bereich bestimmt, wo für wenigstens einen Eigenwert  $\lambda$   $\operatorname{Re} \lambda < 0$  gilt. Zur Eigenwerteinschließung wird ein auf DONNELLY (1974) zurückgehendes Verfahren herangezogen, welches auf einer Verallgemeinerung des Verfahrens von GERSCHGORIN zur Einschließung von Matrixeigenwerten beruht.

H. KLEINDIENST:

Lineare Varianzminimierung, ein Verfahren zur gleichzeitigen Bestimmung oberer und unterer Schranken für Eigenwerte selbstadjungierter Operatoren

Für selbstadjungierte Operatoren, insbesondere Schrödingeroperatoren, wird ein sehr effektives Verfahren angegeben, um sehr genaue obere und untere Schranken für Eigenwerte solcher Operatoren zu erhalten. Als Beispiel wird für den Grundzustand  $E_0$  des He-Atoms die folgende Abschätzung erreicht:

$$-2.9037243770341_4 < E_0 < -2.9037243770341_1$$

Das Verfahren beruht auf einer Minimierung der Varianz, d. h. des Funktionals

$$F(u) = \|Hu\|^2 - (Hu|u)^2$$

Es ist ein Analogon zum Ritzschen Variationsprinzip mit dem Vorteil, zusätzlich auch untere Schranken zu liefern. Das Problem der "Nicht-linearität" kann durch einen sehr schnell konvergierenden Iterationsprozeß bewältigt werden.

A. KNYAZEV:

The Temple-Lehmann Method for Finding Two-sided Bounds for Eigenvalues

The accuracy estimates and asymptotic properties of the Temple-Lehmann method were presented with possibility of application of the two-sided estimators to domain decomposition techniques. The method was illustrated with numerical experiments with an L-shaped domain with 200,000 mesh nodes.

N. J. LEHMANN:

Anwendung der adaptiven Approximation bei Rand- und Eigenwertproblemen

Soll  $f$  durch Elemente des mit dem Fundamentalsystem  $\{\phi_1, \dots, \phi_n\}$  eines linearen Differentialoperators  $L_n(y; a_1, \dots, a_m)$   $n$ -ter Ordnung aufgespannten Vektorraumes approximiert werden, so ist es aus praktischen Gründen zweckmäßig, in 2 Schritten vorzugehen:

1. Adaption von  $L_n(y; a_1, \dots, a_m)$  an  $f$ , indem mit geeignetem "Mass"

$L_n(f; a_1, \dots, a_m) \rightarrow 0$  gefordert und die  $a_i$  bestimmt werden.

2. Übliche Approximation von  $f$  mittels der nach 1 festgelegten

Lösungen von  $L_n(y; a_1, \dots, a_m) = 0$ .

(Im Falle der Vorschriften  $[L_n(f)]_{x=x_0}^{(k)} = 0$  ( $k=0, \dots, m-1$ ) zur

Adaption und  $\sum_{i=1}^n c_i \phi_i^{(k)}(x_0) = f^{(k)}(x_0)$  ( $k=0, \dots, n-1$ ) bei der

Approximation ergibt sich die übliche Padé-Schmiegun mit einer Fehlerordnung  $O(|x-x_0|^{n+m})$ .)

Während sich die Padé-Approximation sofort für z. B. Anfangswertprobleme bei Differentialgleichungen anwenden läßt, ist das bei

Randwertproblemen schwierig (es fehlen Ableitungen am Punkt  $x_s$ ). Es ist entscheidend, daß sich die Adaption bereits für jedes Element des von  $\{f_1, \dots, f_p\}$  aufgespannten Vektorraums ausführen läßt und dann die Approximation mittels des vom Fundamentalsystem von  $L_n(y; a_1, \dots, a_{p \cdot k})$  aufgespannten Raumes mit der gleichen Fehlerordnung  $O(|x-x_0|^{n+k})$  möglich ist. (Diese Ergebnisse lassen sich bei der Anpassung von Koordinatenfunktionen für Verfahren der Eigenwertberechnung unmittelbar einsetzen.)

Zur effizienten Ausführung von Differentiationen oder Bestimmung von Lipschitz-Schranken beliebiger Ordnung wurde eine TURBO-PASCAL Erweiterung implementiert, die den zugehörigen Compiler gleichzeitig zur internen "Formelmanipulation" ausnutzt und damit die Vorzüge von TURBO-PASCAL bei der Werteberechnung voll wirksam beibehält. Hierzu wurde das Grundprinzip dargelegt.

I. MAREK:

Multi-level aggregation methods of computing stationary distributions of Markov processes

An efficient two-(multi-)stage method of iterative computing an eigenvector of an operator belonging to a dominant positive eigenvalue is presented. The method and some of its properties are illustrated by means of a reactor physics problem.

I. MAREK / J. ROHN:

Spectral properties of real interval matrices

Some spectral properties (spectrum and the set of "eigenvectors") of some interval matrices are presented. The results appropriately correspond to natural expectation.

J. NEUSTUPA:

Stability analysis of a vibrating and rotating beam

We study the stability of a zero solution of a system of two partial differential equations describing two-dimensional vibrations of a

beam. Equations contain three parameters (or eventually more generally: functions) representing powers or moments acting to the beam.

Analysing the spectrum of a certain differential operator, we derive sufficient conditions for the stability. Specially, we describe numerically the border between the domain of stability and the domain of instability in  $R$  (the space of parameters). Various types of boundary conditions are discussed. Results can be applied for instance to the vibrations of a rotating axis of a turbine or a compressor.

G. OPFER:

Singular values of certain Vandermonde matrices

In a first part there is a report on the solution of the Chebyshev-Vandermonde system  $V^T a = f$  arising in polynomial interpolation by an algorithm which is progressive, stable and using  $O(n^2)$  steps. Cf. L. Reichel & G. Opfer: Chebyshev-Vandermonde systems, Bergen Scientific Centre, BSC 88/48, 33 p. The stability measured by the condition number of  $V$  can be estimated. In one case explicit singular values are given.

In a second part the problem is extended to rational interpolation where the corresponding system  $V^T a = 0$  is underdetermined and homogeneous. If one restricts the interpolation problem to the case where Thiele's continued fraction is applicable, a progressive algorithm will be derived. The stability problem will be discussed.

M. H. C. PAARDEKOOPER:

Parallel computation of eigenvalues of nonsymmetric matrices  
A quadratically convergent parallel Jacobi-process for diagonally dominant matrices

We present a new Jacobi-like eigenvalue algorithm for nonhermitean almost diagonal  $n \times n$  matrices. In each step  $n/2$  submatrices of order 2 are diagonalized. We prove that the recursively constructed

sequence of matrices converges to a diagonal matrix. As in the classical Jacobi method the convergence is quadratic. The local information structure makes the process ready to parallel implementation on an array processor or a hypercube. In case of multiple eigenvalues adequate(?) precautions in our algorithm are based on theorems of Fan-Hoffman('54) and Wilkinson('61).

B. N. PARLETT:

The QR algorithm: its forward instability and its failure to converge

Recent work on the QR algorithm, by a variety of researchers, has shown:

1. If the entries in a matrix are thought of as functions of a real parameter  $t$  then there is a complicated system of differential equations such that the values of a solution taken at integer times are precisely the matrices obtained by the QR algorithm.
2. Dynamical systems theory has shown that for a significant set of nonsymmetric matrices the QR algorithm with Rayleigh quotient shift fails to converge and can exhibit chaotic behavior.
3. Although the QR algorithm is backward stable under round-off perturbations it sometimes produces matrices wildly different from those produced in exact arithmetic. For some applications it is important to understand when forward instability can occur.

T. REGINSKA:

Localization refinement for eigenvalues of nonselfadjoint operators

Let us consider an eigenvalue problem for a nonselfadjoint bounded linear operator acting in a Hilbert space. Being given a certain approximation of a simple isolated eigenvalue we look for a computable bound. Thus there arises the problem of the sensitivity of the eigenvalues to perturbations of the operator. To obtain a preliminary error bound we apply the backward error analysis approach presented in the paper of Kahan, Parlett and Jiang [SIAM J. Numer. Anal. 19,



no. 3, 1982]. Next, a possibility of iterative refinement of this eigenvalue localization is demonstrated.

H. R. SCHWARZ:

#### Eigenwertaufgaben und Vorkonditionierung

Es sollen die kleinsten Eigenwerte mit den zugehörigen Eigenvektoren von  $Ax = \lambda Bx$  ( $A, B$  symmetrische, positiv definite Matrizen der großen Ordnung  $n$ , beide schwach besetzt) berechnet werden. Zur Ausnützung der schwachen Besetzung der Matrizen wird die Methode der Rayleigh-Quotient-Minimierung mit Hilfe der vorkonditionierten cg-Methode betrachtet. Zur Berechnung der höheren Eigenpaare wird eine partielle Spektralverschiebung angewandt, deren numerische Stabilität nachgewiesen wird. Schließlich wird die Vorkonditionierung auf die modifizierten Eigenwertprobleme mit Hilfe von Rang-Eins-Modifikationen übertragen, wodurch die Effizienz der Methode auch zur Berechnung dieser Eigenpaare wesentlich gesteigert wird. Beispiele belegen die Güte des Verfahrens.

R. SEYDEL:

#### Detecting Singularities during Continuation

We consider equations depending on a parameter. Branches of solutions are generated by continuation methods. Several problems may arise, making it necessary to detect singularities of (Jacobian-) matrices by "test functions". Algorithms are discussed that are more efficient and better scaled than the traditionally used determinant.

W. SPRÖSSIG:

#### Methoden der Quaternionenanalyse bei der Berechnung unterer Eigenwertschranken nichtlinearer Eigenwertaufgaben

In meinem Vortrag wird eine spezielle Klasse elliptischer nichtlinearer Eigenwertprobleme untersucht. Dabei werden mit Hilfe von Metho-

den der Quaternionenanalysis untere Spektrumsschranken erhalten. Diese Methodik wird am Beispiel des nichtlinearen Stokes-Problems vorgestellt. Falls  $G$  ein beliebiges beschränktes Gebiet im  $\mathbb{R}^3$  ist und von einer glatten Ljapunoff-Fläche berandet ist, kann dies in der Form

$$\left. \begin{aligned} -\Delta u + \beta \operatorname{grad} p &= \Lambda f(u) \\ \operatorname{div} u &= 0 \end{aligned} \right\} \text{ in } G$$
$$u = 0 \quad \text{auf } G$$

beschrieben werden. Im quaternionischen Soboljew-Raum  $W_2^1(G)$  sind für die Bedingungen

(i)  $\|f(u)\| \leq A\|u\|^S + B$  und (ii)  $\|f(u) - f(v)\| \leq C\|u-v\|$  notwendig. Eine untere Schranke für das Spektrum lautet dann

$$\Lambda_* = \lambda_1 \left[ (1 + \lambda_1)^{\frac{1}{2}} \max\{A+B, C\} \right]^{-1}$$

wobei  $\lambda_1$  der erste Eigenwert des Dirichlet-Problems ist.

A. TONDL:

#### Backbone curves for systems with a single non-linear spring

The paper presents an approach for an approximative determination of backbone curves for discret chain systems (each mass has one degree of freedom and the neighbouring masses are connected with a single spring) under the assumption that the springs are linear with the exception of a single one having symmetric characteristic. For this case the proposed method is substantially more precise than the usual approach using the transformation into quasinormal coordinates. It is shown that for greater deflections the drawback of the method using the quasinormal mode approximation is not only quantitative but also of qualitative character.

B. WERNER:

#### Eigenvalue problems with the symmetry of a group and bifurcations

For parameter dependent nonlinear  $\Gamma$ -equivariant dynamical systems  $\dot{x} = g(x, \lambda)$ ,  $g: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ ,  $g(\gamma x, \lambda) = \gamma g(x, \lambda)$ ,  $\gamma \in \Gamma$ ,  $x \in \mathbb{R}^n$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$ ,

along a branch of  $\Gamma$ -symmetric equilibria  $\{(x(s), \lambda(s)) : s \in I\}$   
the Jacobians  $A(s) := \frac{\partial g}{\partial x}(x(s), \lambda(s))$  share the  $\Gamma$ -equivariance  
with  $g(\cdot, \lambda)$ :

$$\gamma A(s) = A(s) \gamma \quad \text{for all } \gamma \in \Gamma$$

(Here  $\Gamma$  is a compact Lie group of orthogonal  $n \times n$ -matrixes.)  
Since the eigenvalues  $\mu(s)$  of  $A(s)$  are responsible for steady state  
and Hopf and Takens-Bogdanov bifurcation, we are interested how the  
eigenvalues  $\mu(s)$  of  $\Gamma$ -symmetric matrices  $A(s)$  change with  $s$ . We show  
that the block diagonalization of all  $\Gamma$ -symmetric matrices due to a  
symmetry adapted basis is very useful for the theoretical and the  
numerical treatment of bifurcation problems with symmetries. Examples  
(hexagonal lattice dome, coupled chemical oscillators) are given.

J. R. WHITEMAN:

Of the forms of singularities in elliptic boundary value problems

Effective numerical solution of two- and three-dimensional elliptic  
boundary value problems containing boundary singularities is greatly  
aided by knowledge of the forms of these singularities. For the  
derivation of error estimates for numerical solutions in these cases  
it is necessary to know the regularity of the analytic solutions  
of the problems. It is often the case that the derivation of the  
dominant term in the singular form, which determines the regularity  
of the solution, requires that an eigenvalue problem be solved.

A number of boundary value problems containing singularities will  
be presented and their numerical solution with finite element  
methods, together with error estimates and superconvergence  
properties, will be discussed.

S. ZIMMERMANN:

A comparison of convergence rates of upper and lower bounds to  
eigenvalues

We are considering the Temple/Collatz/Lehmann-method for calculating  
outer bounds and the Rayleigh/Ritz-method for calculating inner  
bounds to eigenvalues of linear symmetric compact operators. It is

shown that the outer bounds have at least the same convergence rate as the inner bounds. The results are reformulated for eigenvalue problems with differential equations and they are illustrated by some numerical examples.

Berichterstatter: J. Albrecht

Tagungsteilnehmer

Prof.Dr. Julius Albrecht  
Institut für Mathematik  
der TU Clausthal  
Erzstr. 1

3392 Clausthal-Zellerfeld 1

Prof.Dr. L. Bittner  
Sektion Mathematik  
Ernst-Moritz-Arndt-Universität  
F.-L.-Jahn-Str. 15a

DDR-2200 Greifswald

Prof.Dr. Götz Alefeld  
Institut für Angewandte Mathematik  
der Universität Karlsruhe  
Kaiserstr. 12

7500 Karlsruhe 1

Prof.Dr. E. Brommundt  
Institut für Technische Mechanik  
Technische Universität  
Postfach 3329  
Spielmannstr. 11

3300 Braunschweig

Prof.Dr. J. Baranger  
LAN Bat. 101  
Universite Claude Bernard de Lyon I  
43, Bd. du 11 Novembre 1918

F-69622 Villeurbanne Cedex

Prof.Dr. F. Chatelin  
Centre Scientifique  
IBM France  
5 place Vendome.

F-75021 Paris Cedex 01

Prof.Dr. Christopher Beattie  
Dept. of Mathematics  
Virginia Polytechnic Institute and  
State University  
460 McBryde Hall

Blacksburg , VA 24061-0123  
USA

Prof.Dr.Dr.h.c. Lothar Collatz  
Eulenkugstr. 84

2000 Hamburg 67

H. Behnke  
Fachbereich Mathematik  
und Informatik  
der TU Clausthal  
Erzstr. 1

3392 Clausthal-Zellerfeld 1

Prof.Dr. H. El Amri  
Centre de Mathematiques Appliquees  
et Industrielle  
Universite Lyon I  
43, Bd. du 11 Novembre 1918

F-69622 Villeurbanne Cedex

Prof.Dr. Isaac Elishakoff  
Center for Applied Stochastic  
Research  
Florida Atlantic University  
Boca Raton , FL 33431-0991  
USA

Prof.Dr. Rainer Hettich  
Fachbereich IV  
Mathematik  
der Universität Trier  
Postfach 3825  
5500 Trier

Prof.Dr. Ludwig Elsner  
Fakultät für Mathematik  
der Universität Bielefeld  
Postfach 8640  
4800 Bielefeld 1

Prof.Dr. Karl-Heinz Hoffmann  
Mathematisches Institut  
der Universität Augsburg  
Universitätsstr. 8  
8900 Augsburg

Prof.Dr. Friedrich Goerisch  
Institut für Mathematik  
der TU Clausthal  
Erzstr. 1  
3392 Clausthal-Zellerfeld 1

Prof.Dr. T. Huckle  
Institut für Angewandte Mathematik  
und Statistik  
der Universität Würzburg  
Am Hubland  
8700 Würzburg

Prof.Dr. Peter Hagedorn  
Institut für Mechanik  
Technische Hochschule Darmstadt  
Hochschulstr. 1  
6100 Darmstadt

Dr. Roger van Keer  
Seminarie voor Wiskundige Analyse  
Faculteit Toegepaste Wetenschappen  
Sint-Pietersnieuwstraat 39  
B-9000 Gent

Prof.Dr. Klaus Helfrich  
Iwan-N.-Stranski Institut für  
Physikalische u.Theoretische Chemie  
Ernst-Reuter-Platz 7  
1000 Berlin 10

Dr. P. P. Klein  
Rechenzentrum  
Technische Universität Clausthal  
Erzstr. 51  
3392 Clausthal -Zellerfeld

Prof.Dr. H. Kleindienst  
Institut für Physikalische Chemie  
Universität Düsseldorf  
Universitätsstr. 1

4000 Düsseldorf

Prof.Dr. Ulrich Mertins  
Institut für Mathematik  
der TU Clausthal  
Erzstr. 1

3392 Clausthal-Zellerfeld 1

Prof.Dr. A. V. Knyazev  
Dept. of Numerical Mathematics  
USSR Academy of Sciences  
29, Ryleeva Street

Moscow 103 009  
USSR

Prof.Dr. Jiri Neustupa  
Dept. of Mathematics  
Technical University  
Suchbatarova 4

16607 Praha 6.  
CZECHOSLOVAKIA

Prof.Dr. N.J. Lehmann  
Thälmannstr. 9 V

DDR-8010 Dresden

Prof.Dr. Gerhard Opfer  
Institut für Angewandte Mathematik  
der Universität Hamburg  
Bundesstr. 55

2000 Hamburg 13

Prof.Dr. Ivo Marek  
Katedra numerické matematiky  
MFF UK University Karlovy  
Malostranské nám. 25

118 00 Praha 1  
CZECHOSLOVAKIA

Prof.Dr. M.H.C. Paardekooper  
Subfaculteit Econometrie  
Katholieke Hogeschool te Tilburg  
Hogeschoollaan 225

NL-5037 GC Tilburg

Prof.Dr. Reinhard Mennicken  
Fakultät für Mathematik  
der Universität Regensburg  
Universitätsstr. 31  
Postfach 397

8400 Regensburg

Prof.Dr. B.N. Parlett  
Dept. of Mathematics  
University of California

Berkeley, CA 94720  
USA

Prof.Dr. T. Reginska  
Institute of Mathematics of the  
Polish Academy of Sciences  
ul. Sniadeckich 8

00-950 Warszawa  
POLAND

Prof.Dr. Sc.A. Tondl  
Zborovska 41

15000 Praha 5  
CZECHOSLOVAKIA

Prof.Dr. K. Rektorys  
Dept. of Mathematics  
Technical University of Prague  
Thakurova 7

166 29 Praha 6  
CZECHOSLOVAKIA

Prof.Dr. Waldemar Velte  
Institut für Angewandte Mathematik  
und Statistik  
der Universität Würzburg  
Am Hubland

8700 Würzburg

Prof.Dr. Hans-Rudolf Schwarz  
Institut für Angewandte Mathematik  
der Universität Zürich  
Rämistr. 74

CH-8001 Zürich

Prof.Dr. Bodo Werner  
Institut für Angewandte Mathematik  
der Universität Hamburg  
Bundesstr. 55

2000 Hamburg 13

Prof.Dr. Rüdiger Seydel  
Institut für Angewandte Mathematik  
und Statistik  
der Universität Würzburg  
Am Hubland

8700 Würzburg

Prof.Dr. John R. Whiteman  
Institute of Computational  
Mathematics  
Brunel University  
Kingston Lane

GB- Uxbridge, Middlesex UB8 3PH

Prof.Dr. W. Sprössig  
Sektion Mathematik  
Bergakademie Freiberg  
Bernhard-von-Cotta-Str. 2

DDR-9200 Freiberg

Dr. Sabine Zimmermann  
Fachbereich Mathematik  
der TH Darmstadt  
Schloßgartenstr. 7

6100 Darmstadt