A.R.高尔腊伊　G.A.瓦特桑著

矩阵特征问题的计算方法

JUZHEN TEZHENG WENTI DE JISUAN FANGFA

上海科学技术出版社

矩阵特征问题的计算方法

A. R. 高尔腊伊　G. A. 瓦特桑　著

唐焕文　冯恩民　夏尊铨　译

张义燊等校

上海科学技术出版社

内 容 简 介

本书是关于矩阵特征值与特征矢量计算的一本简明教程，论述了通常较为有效的计算方法，内容结构紧凑，文体简洁，系统完整。可供计算数学、最优化、系统工程、经济学以及工程振动方面的研究人员、工程师、高等学校的教师和学生参考。

Computational Methods
for
Matrix Eigenproblems
A. R. Gourlay G. A. Watson
John Wiley & Sons. Inc., 1973.

矩阵特征问题的计算方法

A. R. 高尔腊伊 G. A. 瓦特桑 著
唐焕文 冯恩民 夏尊铨 译
张文籁等校
上海科学技术出版社出版
（上海瑞金二路450号）
新华书店上海发行所发行 无锡县人民印刷厂印刷
开本787×1092 1/32 印张5.125 字数109,000
1980年10月第1版 198[illegible]年6月第2次印刷
印数 9,201—18,100
书号：13119·884 定价：（科四）0.50元

序　言

自 1947 年以来，纯粹数学与应用数学家，计算机科学家，工程师等许多方面的专家们都为数值分析这个领域贡献了力量，他们所作的整个努力，是为了设计和分析针对着在解答各领域问题中有用和有价值的一些方法．数值分析中的一个课题领域就是计算线代数，在这个课题领域中，这种努力已经取得丰硕的成果．现在，我们对矩阵问题的理解比起对数值分析中任一其它分支的理解要更完整得多．对于求解线性方程组以及处理几乎所有常常出现的特征问题，我们有了强有力的算法．更为重要的也许是：对于这些算法有了可靠的、完善的计算机程序．这个学科的大部分内容都包含在 Wilkinson 的名著(«代数特征值问题», O. U. P., 1965)中．其余的部分是包含在更新的文献中．

线性方程组的数值解法及矩阵特征问题的数值解法是数值分析课程中的基本论题．因此，适应于这样一些方面的教科书的出现是合乎需要的．对于第一个论题，Forsythe 和 Moler 的书(«线性方程组的计算机解法», Prentice Hall, 1967)是很适宜的．它的简短的文体和按论题分章的风格对教师和学生都是有吸引力的．这本教程就是为第二个论题提供一本类似的书而作的一个尝试．

本书的内容是以作者在 Dundee 大学为理科硕士学生授课时的讲义为基础的．其中的一部分材料在该大学学生的课程中已使用过．所有这些学生已学过矩阵代数的基本课程，并

且熟悉它的基本概念，例如矩阵乘法、反演和行列式的定义等．本书就是为具有这样基础的学生而写的．这个材料既适于作为数学学科中的学生的教程，又适于作为更多的应用学科(例如工程)中的学生的教程，由于本书以特殊的格式来介绍这份材料，所以就其所提供的题材来说，它可成为任一级教程的基础．每章可用一、两讲来完成，而整个教程大约需用十五到二十讲可完成(包括用于参看 Forsythe 和 Moler 著作中的有关章节的时间)．

选取的这些题材仅仅是为了阐述较通用的和较可靠的计算特征问题解的技术．其目的主要是描述计算技术．因此，对每种方法几乎没有谈到其误差分析，尽管如此，对于从有关的误差分析中所引出的结论还是作了应有的强调．希望对本书所涉及到的材料有兴趣的学生，可从 Wilkinson 的书中获得“完整的知识”．

A. R. 高尔腊伊　　G. A. 瓦特森

目　　录

1

引　论

1.1 引言

本书的目的是提供一本解代数特征问题

$$A\mathbf{x}=\lambda\mathbf{x}$$

的数值方法的基本教程，其中 A 是一个已知的 $n\times n$ 矩阵. 数 λ 称为矩阵 A 的本征值，特征根或特征值，而 n 维列矢量 $\mathbf{x}$ 称为 A 的本征矢量，固有矢量或特征矢量. 引论这一章的目的是提供在各种广泛应用领域中所出现的这种问题的某些例子. 假定读者已经熟悉了某些标准的定义和符号约定，而不熟悉这些内容的读者应参考第二章，这一章汇集了本书的标准符号以及较为有用的结果. 下面各节的叙述是彼此完整独立的.

1.2 一个几何例子

n 维空间中的一个椭球方程，按照笛卡儿形式，是由

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}z_iz_j+\sum_{j=1}^{n}b_jz_j+c'=0$$

给出，其中 $\mathbf{z}=(z_1,\ z_2,\ \cdots,\ z_n)^T$ 是 n 维空间中的一个点. 用矩阵符号，这个方程可以紧凑地写为

$$\frac{1}{2}\mathbf{z}^TA\mathbf{z}+\mathbf{b}^T\mathbf{z}+c'=0,$$

其中 c' 是一个已知常数，$\mathbf{b}$ 是一个已知矢量，而 A 是一个已

知的对称正定矩阵. 通过适当的平移坐标轴

$$\mathbf{z}=\mathbf{x}-A^{-1}\mathbf{b},$$

这个方程可简化为

$$\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A\mathbf{x}+c=0.$$

如果这个超椭球上的一点 $\mathbf{x}$ 的位置矢量与 $\mathbf{x}$ 处的梯度矢量一致，那么 $\mathbf{x}$ 就是这个超椭球的主轴. 于是，这个主轴的集合就是那些同时对应了位置矢量与梯度矢量的方向. 一个二维的例子将有助于阐明这一点.（这里 $\mathbf{x}$ 的两个分量用 x,y 表示.）在图 1 中，画出了曲线

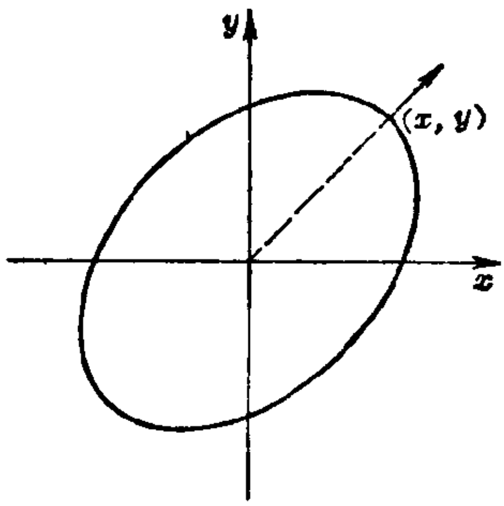

图 1

$$ax^2+2bxy+cy^2=d.$$

在一般的点 (x, y) 处，梯度的方向为 $(ax+by,\ bx+cy)$. 在图 1 中的特殊点 (x, y) 处，梯度矢量与以原点为始点的位置矢量有相同的方向. 从而在这一点 (x, y) 处（以及在任一类似的点处）存在某个数 λ，使得

$$ax+by=\lambda x,$$
$$bx+cy=\lambda y,$$

或用矩阵符号表示为

$$\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}.$$

由这个方程，可推出：主轴是由矩阵

$$\begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix}$$

的特征矢量给出的.

回到 n 维的例子，就可以看到，梯度矢量是由

$$\mathbf{g}=A\mathbf{x}$$

给出的．于是，主轴由 n 个满足

$$A\mathbf{x}=\lambda\mathbf{x}$$

的(非平凡)矢量 $\mathbf{x}$ 给出，即由 A 的 n 个特征矢量给出．

1.3 微小振动

特征问题的丰富来源的一个方面就是动力学系统和结构系统中的振动问题的研究．下面所给出的例子是考察在张力作用下的弦上的质点的微小振动．为使问题的分析不致太复杂，我们作一些简化假设．于是，假设弦是均匀的，重力忽略不计，并且在垂直于弦的静止位置的方向上的振动很小．现在来具体地研究在张力 F 作用下，弦上四个等距离分布的不同质点的运动．这个系统表示在图 2 中．

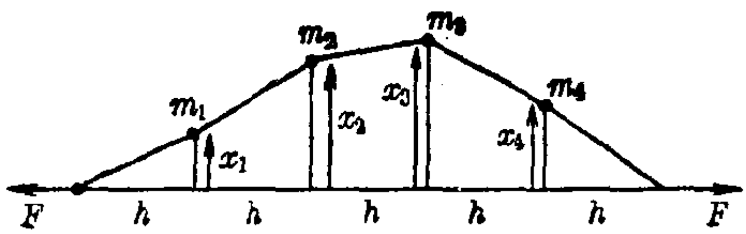

图 2

在上述标准的假设下，这个系统的方程组由

$$m_1\frac{d^2x_1}{dt^2}=-F\frac{x_1}{h}+F\left(\frac{x_2-x_1}{h}\right),$$

$$m_2\frac{d^2x_2}{dt^2}=-F\left(\frac{x_2-x_1}{h}\right)+F\left(\frac{x_3-x_2}{h}\right),$$

$$m_3\frac{d^2x_3}{dt^2}=-F\left(\frac{x_3-x_2}{h}\right)-F\left(\frac{x_3-x_4}{h}\right),$$

$$m_4\frac{d^2x_4}{dt^2}=+F\left(\frac{x_3-x_4}{h}\right)-F\frac{x_4}{h}$$

给出.

在此定义矢量 $\mathbf{x}=(x_1, x_2, x_3, x_4)^T$, 并令

$$d_i=\frac{m_i h}{F}, \quad i=1, 2, 3, 4.$$

这个方程组可用矩阵符号写成

$$D\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2}=T\mathbf{x}, \tag{1}$$

其中 D 是对角矩阵

$$D=\begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_4 \end{bmatrix},$$

而 T 是三对角线矩阵

$$T=\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}.$$

当这一系统按正规模式振动时, 其方程

$$\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2}=-w^2\mathbf{x} \tag{2}$$

成立. (在这种情况下, 质点都以同相或反相振动.) 将(2)代入(1), 就可得到关于正规频率 $w_1, \cdots, w_4$ 及其相应的正规模式的特征问题

$$Dw^2\mathbf{x}=-T\mathbf{x}. \tag{3}$$

虽然初看起来这好象是个形如

$$(A-\lambda B)\mathbf{x}=0$$

的一个广义特征问题, 但因 D 的元素都是正的, 所以容易将它变成标准的对称三对角型问题

$$D^{-1/2}T'D^{-1/2}\mathbf{y}=-w^2\mathbf{y},$$

其中 $\mathbf{y}=D^{1/2}\mathbf{x}$.

容易将这个模型推广到一根弦上有 n 个质点的一般情况，这就导致对(3)式的一个 n 维模拟. 矩阵 T 还是三对角线矩阵. 事实上，它是在数值分析中经常出现的一种特殊矩阵，其特征值可用解析式表达出来.

1.4 信息系统设计中的一个例子

如果我们把一个信息(存贮和检取两方面)系统看作是由部件子系统所组成，这些子系统同时操作和执行一组运算，以完成这个系统的确定功能，那么这样一种系统的设计目的可叙述为：

(1) 确定这个系统的功能.

(2) 选择部件子系统，以最优的方式达到这一功能.

在这个问题的下述分析中，我们将会看到一种特殊矩阵的特征矢量起着重要的作用. 我们由这个模型中所用到的几个定义开始.

一个任务定义为系统的功能. 它是由一组操作 $O_1, O_2, \cdots, O_m$ 和每种操作的容量(或工作负荷) $V_1, V_2, \cdots, V_m$ 共同组成. 一个部件就是完成这些操作中某些部分的一种完全确定的设备. 一个已知部件完成一种给定操作的效率是用操作的成本、时间和规模的函数来度量的. 例如，一个典型的选择就是

$$e=\frac{ct}{n},$$

其中 c 是单位时间内的成本数(以磅为单位)；t 是所用的时间；n 是操作规模的度量. 为了完成全部所要求的操作而由

部件集 $(S_1, S_2, \cdots, S_n)$ 所构成的整个系统用一个 $n\times m$ 的效率矩阵 E 来表示，其中 (i, j) 处的元素为 e_{ij}，例如

$$e_{ij}=c_{ij}t_{ij}/n_{ij}.$$

它是第 i 个部件完成操作 O_j 的效率.

由于设计上述系统是用来完成由一些操作及每种操作的容量共同组成的一项指定的任务，因此，这个系统完成这项任务的成本是

$$\mathbf{x}=E\mathbf{V},$$

其中

$$\mathbf{x}=(x_1, x_2, \cdots, x_n)^T,$$

$$\mathbf{V}=(V_1, V_2, \cdots, V_m)^T.$$

于是，由 E, $\mathbf{V}$ 和 $\mathbf{x}$ 就给出了这个系统及其特性. 这里需要这个系统对于各种不同任务的某种特性的度量，它是由不同的容量矢量 $\mathbf{V}$ 来定义的. Rayleigh 商

$$a^2=\frac{(E\mathbf{V})^T(E\mathbf{V})}{\mathbf{V}^T\mathbf{V}}$$

就是一种度量.

通用的或整个系统的设计，包括了计算该系统的最大成本，以及由 E^TE 的最大特征值给出的上述度量的最大值. 此外，相应的 $\mathbf{V}$ 值是由 E^TE 的相应的特征矢量给定的，而这个 $\mathbf{V}$ 值则是达到这种最大值的临界容积.

关于这一应用领域更进一步的详述，可以在 Becker 和 Hayes(1967) 的书中找到.

1.5 非线性最优化中的一个特征问题

非线性最优化中的一个基本问题，就是确定一个 n 维矢量 $\mathbf{x}$，它可使数值函数 $f(\mathbf{x})=f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 达到极小. 假定能计算 $f(\mathbf{x})$ 的梯度，用 $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ 表示它，则可使用某种变尺

度法. 这类算法要使用解的一个初始猜测或估计 $\mathbf{x}_0$ 进而用形如

$$\mathbf{x}_{k+1}=\mathbf{x}_k+t_k\mathbf{d}_k$$

的关系式来计算一个新的点列 $\{\mathbf{x}_k\}$. 其中: $\mathbf{d}_k$ 为方向矢量; t_k 为选使 $f(\mathbf{x}_k+t\mathbf{d}_k)$ 关于 t 取极小的一个正数, 即化为单变量的极小化问题. 变尺度法是以利用形如

$$\mathbf{d}_k=-H_k\mathbf{g}_k$$

的方向矢量为特征的. 其中 $\mathbf{g}_k=\mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$; H_k 是一个对称正定矩阵. 详细阐明这些算法的理论则超出了本节的范围*).

在每一步, 新的近似矩阵 H_{k+1} 是用形如

$$H_{k+1}=H_k+E_k,\quad H_0=I$$

的公式来计算的. 实际上重要的是, 要保证这个矩阵序列 $\{H_k\}$ 是正定的. 即使 H_k 是正定的, 但由于舍入误差的存在, 可能会使 H_{k+1} 变为不定的, 这时, 通常选择校正阵 E_k, 使得 H_{k+1} 变为正定的. J. Greenstadt 提出了一种保证正定性的方法, 它包括对 H_{k+1} 的一个完整的特征分析. 如果 $\{\lambda_i^{k+1}\}$ 和 $\{\mathbf{u}_i^{k+1}\}$ 是 H_{k+1} 的特征值和正交特征矢量, 则可以得到:

$$H_{k+1}=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^{k+1}\mathbf{u}_i^{k+1}\{\mathbf{u}_i^{k+1}\}^T.$$

现在把 H_{k+1} 重新定义为

$$H_{k+1}=\sum_{i=1}^{n}|\lambda_i^{k+1}|\mathbf{u}_i^{k+1}\{\mathbf{u}_i^{k+1}\}^T,$$

这就保证了 H_{k+1} 是非负定的. 但如果集合 $\{\lambda_i^{k+1}\}$ 中的任何一个元素为零, 那么最保险的策略是定义

$$H_{k+1}=I.$$

---

*) 可参看 Luenberger, D. G. «Introduction to Linear and Nonlinear Programming», 1973.——译者注

Greenstadt 提出的这个想法，虽然保证了正定性，但遗憾的是这种算法的计算工作量要大大增加. 所以这种方法仅仅对于维数 n 很小的问题是可行的.

1.6 来自数学经济学的一个例子

在大量的经济学问题的研究中，适用于计划工作者的最有用的工具之一，是由 Leontief 所引入的输入-输出分析. 输入-输出表或 Leontief 矩阵把各个工业部门连接到经济机构的全部工作上. 现在按照 Dernburg, T. F. 和 J. D. Dernburg (1969) 的书来引入一些概念.

当考察一种工业部门的销售数和购买数时，在此用 b_{ij} 表示工业部门 i 对工业部门 j 的销售数，而 b_{ii} 表示工业部门 i 生产的商品的保留数. 用 y_i 表示工业部门 i 的产品对外边用户的销售数，x_i 表示总输出. 于是

$$x_i=y_i+\sum_j b_{ij}. \tag{4}$$

下一步是确定输入系数. 假定工业部门 i 对工业部门 j 的销售数同工业部门 j 的输出量之比成固定比例，则有

$$b_{ij}=a_{ij}x_j.$$

就把量 a_{ij} 定义为输入系数. 由方程(4)可以看到，在静态情况下，有

$$\mathbf{x}=\mathbf{y}+A\mathbf{x}, \tag{5}$$

其中
$$\mathbf{x}=(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n)^T,$$
$$\mathbf{y}=(y_1,\ y_2,\ \cdots,\ y_n)^T,$$

而 A 是一个 $n\times n$ 矩阵，它的 $(i,\ j)$ 处的元素为 a_{ij}. 矩阵 $(I-A)$ 称为 Leontief 矩阵. 方程(5)可以用于确定工业部门所要求的总输出量 $\mathbf{x}$，以满足预定的最终需求量 $\mathbf{y}$.

如果供求不是平衡的，那么就需要用动态模型来代替方