特征值的上下限和求特征值的一个迭代算法

蔡承武　吴福光
（力学系）

摘　要

本文在已知某近似特征对的基础上，给出了一个简单和有效的求特征值上下限的方法，并且近似特征值肯定属于上下限之一．此外，文中还提供了一个矩阵特征值问题的从单边逼近精确值的迭代算法．

对称正定矩阵广义特征值问题的近似解法中，为了能算出近似值的误差，已有若干文章[1-6]讨论了特征值的上下限问题，并且得出了几个可供实用的计算公式，但这些公式并不能回答近似特征值究竟是精确值（指最靠近近似值的特征值，以下同）的上限还是下限。本文在已知某近似特征对的基础上，给出了一个比较简单和有效的求特征值上下限的方法，并且近似特征值肯定属于上下限之一。此外，文中还提供了一个从单边逼近精确值的迭代算法。

一、包含定理及其推论

考虑n个自由度的广义特征值问题

$$(\mathbf{K}-\lambda\mathbf{M})\mathbf{X}=0, \tag{1.1}$$

式中K、M为实对称正定矩阵．设已用某种方法求得方程(1.1)的一组良好的近似解λ_0，$\mathbf{X}_0$〔注〕，令

$$\lambda^*=\lambda_0+\frac{\mathbf{X}_0^T\mathbf{M}\mathbf{X}_0}{\mathbf{X}_0^T\mathbf{M}\mathbf{X}_1}, \tag{1.2}$$

其中$\mathbf{X}_1$是如下方程的解：

本文1984年9月收到

〔注〕 良好的近似解定义如下：设λ_0与第k个特征值最接近，将$\mathbf{X}_0$按特征矢量展开，$\mathbf{X}_0$所对应的动能系数$\mathbf{X}_0^T\mathbf{M}\mathbf{X}_0$中，第$k$个特征矢量的贡献至少占一半．

$$(\mathbf{K}-\lambda_0\mathbf{M})\mathbf{X}_1=\mathbf{M}\mathbf{X}_0, \tag{1.3}$$

则最靠近λ_0的特征值必在λ_0与λ^*之间。

证明 设λ_i，$\boldsymbol{\varphi}_i(i=1,2,\cdots,n)$是特征值问题(1.1)的特征对，且设$\boldsymbol{\varphi}_i$是已经归一化的，于是有

$$\left.\begin{aligned}&(\mathbf{K}-\lambda_i\mathbf{M})\boldsymbol{\varphi}_i=\mathbf{0},\\&\boldsymbol{\varphi}_i^T\mathbf{M}\boldsymbol{\varphi}_i=1\\&\boldsymbol{\varphi}_i^T\mathbf{K}\boldsymbol{\varphi}_i=\lambda_i\end{aligned}\right\}\quad(i=1,2,\cdots,n) \tag{1.4}$$

我们把与λ_0最靠近的特征值记为λ_k，即

$$|\lambda_k-\lambda_0|<|\lambda_i-\lambda_0|,\qquad(i\neq k;i=1,2,\cdots,n) \tag{1.5}$$

按展开定理，$\mathbf{X}_0$和$\mathbf{X}_1$都可以按$\boldsymbol{\varphi}_1,\boldsymbol{\varphi}_2,\cdots,\boldsymbol{\varphi}_n$展开：

$$\mathbf{X}_0=\boldsymbol{\phi}\mathbf{C}_0,\qquad \mathbf{X}_1=\boldsymbol{\phi}\mathbf{C}_1 \tag{1.6}$$

这里，

$$\boldsymbol{\phi}=[\boldsymbol{\varphi}_1\boldsymbol{\varphi}_2\cdots\boldsymbol{\varphi}_n],\qquad \mathbf{C}_0=\begin{Bmatrix}c_1\\c_2\\\vdots\\c_n\end{Bmatrix} \tag{1.7}$$

列阵$\mathbf{C}_1$待求。

式(1.3)可写为

$$(\mathbf{K}-\lambda_0\mathbf{M})\boldsymbol{\phi}\mathbf{C}_1=\mathbf{M}\boldsymbol{\phi}\mathbf{C}_0, \tag{1.8}$$

以$\boldsymbol{\phi}^T$左乘上式两端，并注意到式(1.4)得

$$(\boldsymbol{\Lambda}-\lambda_0\mathbf{I})\mathbf{C}_1=\mathbf{C}_0, \tag{1.9}$$

其中$\boldsymbol{\Lambda}$表示对角线上的元素为λ_i的对角矩阵，$\mathbf{I}$为单位矩阵。由式(1.9)得到

$$\mathbf{C}_1=(\boldsymbol{\Lambda}-\lambda_0\mathbf{I})^{-1}\mathbf{C}_0=\begin{Bmatrix}\dfrac{c_1}{\lambda_1-\lambda_0}\\\dfrac{c_2}{\lambda_2-\lambda_0}\\\vdots\\\dfrac{c_n}{\lambda_n-\lambda_0}\end{Bmatrix} \tag{1.10}$$

由式(1.2)有

$$\lambda^*-\lambda_0=\frac{\mathbf{X}_0^T\mathbf{M}\mathbf{X}_0}{\mathbf{X}_0^T\mathbf{M}\mathbf{X}_1}=\frac{\mathbf{C}_0^T\boldsymbol{\phi}^T\mathbf{M}\boldsymbol{\phi}\mathbf{C}_0}{\mathbf{C}_0^T\boldsymbol{\phi}^T\mathbf{M}\boldsymbol{\phi}\mathbf{C}_1}=\frac{\sum_{i=1}^{n}c_i^2}{\sum_{i=1}^{n}\dfrac{c_i^2}{\lambda_i-\lambda_0}}$$

$$=\frac{c_k^2\left(1+\sum_{i\neq k}\dfrac{c_i^2}{c_k^2}\right)}{\dfrac{c_k^2}{\lambda_k-\lambda_0}\left(1+\sum_{i\neq k}\dfrac{\lambda_k-\lambda_0}{\lambda_i-\lambda_0}\dfrac{c_i^2}{c_k^2}\right)}=(\lambda_k-\lambda_0)\frac{\left(1+\sum_{i\neq k}\dfrac{c_i^2}{c_k^2}\right)}{\left(1+\sum_{i\neq k}\dfrac{\lambda_k-\lambda_0}{\lambda_i-\lambda_0}\dfrac{c_i^2}{c_k^2}\right)}, \tag{1.11}$$

由于

$$\left|\frac{\lambda_k-\lambda_0}{\lambda_i-\lambda_0}\right|<1,\quad (i\neq k;i=1,2,\cdots,n)$$

并按良好近似解的定义，$c_k^2\geqslant\sum\limits_{i\neq k}c_i^2$，因此有

$$\left|\sum_{i\neq k}\frac{\lambda_k-\lambda_0}{\lambda_i-\lambda_0}\frac{c_i^2}{c_k^2}\right|<\sum_{i\neq k}\left|\frac{c_i^2}{c_k^2}\right|\leqslant 1.$$

于是式(1.11)右端的分母大于零而小于分子，从而推出

$$\frac{1+\sum\limits_{i\neq k}\dfrac{c_i^2}{c_k^2}}{1+\sum\limits_{i\neq k}\dfrac{\lambda_k-\lambda_0}{\lambda_i-\lambda_0}\dfrac{c_i^2}{c_k^2}}>1 \tag{1.12}$$

因此可令

$$\lambda^*-\lambda_0=(\lambda_k-\lambda_0)(1+\varepsilon), \tag{1.13}$$

其中$\varepsilon>0$。得

$$\lambda^*=\lambda_k+(\lambda_k-\lambda_0)\varepsilon \tag{1.14}$$

如$\lambda_0<\lambda_k$，则$\lambda^*>\lambda_k$；如$\lambda_0>\lambda_k$，则$\lambda^*<\lambda_k$。因此，最靠近λ_0的特征值必在λ_0与λ^*之间，并且近似特征值λ_0肯定属于上下限之一。定理证毕。

推论　若λ_0，$\mathbf{X}_0$为特征值问题(1.1)的良好近似特征对，则当$\mathbf{X}_0^T\mathbf{M}\mathbf{X}_1$取正值时，$\lambda_0$为精确值的下限，当$\mathbf{X}_0^T\mathbf{M}\mathbf{X}_1$取负值时，$\lambda_0$为精确值的上限，其中$\mathbf{X}_1$为方程(1.3)的解。

例1　已知

$$\mathbf{K}=\begin{pmatrix}2&-1&&&0\\-1&2&-1&&\\&-1&2&-1&\\&&-1&2&-1\\0&&&-1&1\end{pmatrix},\qquad \mathbf{M}=\begin{pmatrix}1&&&&0\\&1&&&\\&&1&&\\&&&1&\\0&&&&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

设已用里兹法求得(1.1)的第一阶特征对的近似解为

$$\lambda_0=0.1013,\quad \mathbf{X}_0=\frac{1}{7.552}\begin{Bmatrix}1.506\\2.506\\3.506\\4.000\\4.494\end{Bmatrix},$$

其中$\mathbf{X}_0$已归一化。

求解方程(1.3)得

$$X_1=\begin{Bmatrix}-51.904\\-98.749\\-135.92\\-159.79\\-168.004\end{Bmatrix}$$

由于 $X_0^TMX_1$为负值，因此λ_0为精确值的上限．精确值的下限可从(1.2)求得：

$$\lambda^*=\lambda_0+\frac{1}{X_0^TMX_1}=0.09715.$$

二、从单边逼近精确值的迭代算法

固体力学中的特征值问题，往往下限比上限更重要，例如求稳定性问题的临界载荷，出于结构安全的考虑，最好能求得最小特征值的下限，但现有的计算方法往往得到的是上限（如瑞利——里兹法、子空间迭代法等）．根据本文第一节给出的上下限公式，只要用式(1.2)代替瑞利商作为近似特征值的估计式，与逆迭代法相结合，就很方便地得到从下限（或上限）逼近精确值的迭代算法，其步骤如下：

设初值为μ_0, X_0(μ_0不是精确值）．不妨设X_0已归一化，即

$$X_0^TMX_0=1, \tag{2.1}$$

进行逆迭代：

$$(K-\mu_0M)X_1=MX_0, \tag{2.2}$$

求出X_1后，按式(1.2)求得第一次近似

$$\mu_1=\mu_0+\frac{1}{X_0^TMX_1}, \tag{2.3}$$

将X_1归一化后仍用同一个记号．求第二次近似时，用μ_0, X_1为初值，重复以上步骤，即

$$(K-\mu_0M)X_2=MX_1, \tag{2.4}$$

$$\mu_2=\mu_0+\frac{1}{X_1^TMX_2}, \tag{2.5}$$

不断重复上述过程，求得$\mu_1, \mu_2, \mu_3, \cdots$．序列的收敛性可证明如下：

设X_0的展开系数C_0如式(1.7)所示，则逆迭代m次后得到的X_m的展开系数为

$$C_m=\begin{Bmatrix}\dfrac{c_1}{(\lambda_1-\mu_0)^m}\\ \dfrac{c_2}{(\lambda_2-\mu_0)^m}\\ \vdots\\ \dfrac{c_n}{(\lambda_n-\mu_0)^m}\end{Bmatrix}. \tag{2.6}$$

仿照第一节的推导，可得

$$\mu_m-\mu_0=\frac{X_{m-1}^T M X_{m-1}}{X_{m-1}^T M X_m}=\frac{\left(\frac{1}{\lambda_k-\mu_0}\right)^{2m-2}c_k^2\left[1+\sum_{i\neq k}\left(\frac{\lambda_k-\mu_0}{\lambda_i-\mu_0}\right)^{2m-2}\frac{c_i^2}{c_k^2}\right]}{\left(\frac{1}{\lambda_k-\mu_0}\right)^{2m-1}c_k^2\left[1+\sum_{i\neq k}\left(\frac{\lambda_k-\mu_0}{\lambda_i-\mu_0}\right)^{2m-1}\frac{c_i^2}{c_k^2}\right]}$$

$$=(\lambda_k-\mu_0)(1+\varepsilon_m). \tag{2.7}$$

其中

$$\varepsilon_m=\frac{\sum_{i\neq k}\left(\frac{\lambda_k-\mu_0}{\lambda_i-\mu_0}\right)^{2m-2}\left(\frac{\lambda_i-\lambda_k}{\lambda_i-\mu_0}\right)\frac{c_i^2}{c_k^2}}{1+\sum_{i\neq k}\left(\frac{\lambda_k-\mu_0}{\lambda_i-\mu_0}\right)^{2m-1}\frac{c_i^2}{c_k^2}}>0, \tag{2.8}$$

由于$\left|\frac{\lambda_k-\mu_0}{\lambda_i-\mu_0}\right|<1$,所以

$$\lim_{m\to\infty}\varepsilon_m=0^+. \tag{2.9}$$

由式(2.7)得出

$$\mu_m=\lambda_k+(\lambda_k-\mu_0)\varepsilon_m. \tag{2.10}$$

若$\mu_0>\lambda_k$,则序列$\mu_1,\mu_2,\cdots\cdots$从下限趋近于λ_k;若$\mu_0<\lambda_k$,则μ_m从上限趋近于λ_k。

最后，需要补充指出的是，只要初始值X_0不与第k阶特征矢量φ_k正交，当逆迭代(1.3)进行多次后，良好近似解的条件$c_k^2\geqslant\sum_{i\neq k}c_i^2$肯定满足。

例2　已知

$$K=\begin{bmatrix}2&-1&0\\-1&2&-1\\0&-1&1\end{bmatrix},\qquad M=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}$$

求方程(1.1)的第一阶特征值。

设已用瑞利法求得第一阶特征对的近似值

$$\lambda=0.2143,\quad X=\begin{Bmatrix}1\\2\\3\end{Bmatrix}$$

取初值

$$\mu_0=0.2143,\quad X=\frac{1}{\sqrt{14}}\begin{Bmatrix}1\\2\\3\end{Bmatrix}$$

求解$(K-\mu_0M)X_1=MX_0$得

$$X_1=\begin{Bmatrix}-20.137\\-36.227\\-45.087\end{Bmatrix}$$

第一次近似为

$$\mu_1=\mu_0+\frac{1}{X_0^T M X_1}=0.19788.$$

求第二次近似时，可取μ_0和经过归一化的X_1为初值，即

$$\mu_0=0.2143,\quad X_1=\frac{-1}{61.243}\begin{Bmatrix}20.137\\36.227\\45.087\end{Bmatrix}$$

求解$(K-\mu_0 M)X_2=MX_1$得

$$X_2=\begin{Bmatrix}20.198\\36.397\\45.386\end{Bmatrix}$$

第二次近似为

$$\mu_2=\mu_0+\frac{1}{X_1^T M X_2}=0.19806$$

本题的精确解（五位有效数字）为$\lambda=0.19806$，可见，本文提供的迭代算法收敛很快。

参 考 文 献

〔1〕胡海昌，固体力学学报，1982，1.
〔2〕胡海昌，振动与冲击，1983,2.
〔3〕胡海昌，力学学报，1983,5.
〔4〕Collatz, L., Eigenwertaufgaben mit Technischen Anwendungen, Akademische Verlagsgesellschafte, 1949.
〔5〕Crandal, S. H., *Engineering Analysis*, Mc Graw-Hill, 1956.
〔6〕Bathe, K.J. and Wilson, E.L., *Numerical Methods in finite Element Analysis*, Prentice Hall, 1976.

Upper and Lower Bounds of Eigenvalues and Iterative Algorithm of Calculating Eigenvalues

Cai Chengwu Wu Fuguang

Abstract

A simple and effective method, which can be used to obtain the upper and lower bounds of eigenvalue from the estimated eigenvector and eigenvalue, is presented. The estimated eigenvalue belongs to one of these bounds. In addition, an iterative algorithm of eigenvalue problems of matrices is given. The values of succesive approximation approach up or down to exact eigenvalue as a limit. A numrical example is given.