§6 广义特征值问题

在工程、物理和化学中常常会遇到一类所谓**广义特征值问题**, 即求数 λ 及非零向量x, 使

$$Ax = \lambda Bx \tag{6.1}$$

或

$$ABx = \lambda x \tag{6.2}$$

等关系式成立, 其中$A = [a_{ij}]$ 为n阶实对称矩阵, $B = [b_{ij}]$ 为n阶实对称正定矩阵. 若将矩阵B作对称三角分解, 则这类特征值问题可以化为一般的对称矩阵的特征值问题.

6.1 问题 $ABx=\lambda x$ 的特征值

由于B是实对称正定矩阵, 因此总存在一个非奇异的下三角阵L, 使得

$$B=LL^T. \tag{6.3}$$

从而,(6.1)式可写成

$$Ax=\lambda Bx$$

上式两端左乘 L^{-1} 得

$$L^{-1}Ax=\lambda LL^T x,$$

或写成

$$L^{-1}A(L^{-1})^T L^T x=\lambda L^T x. \tag{6.4}$$

令

$$L^{-1}A(L^{-1})^T=P, \tag{6.5}$$

$$L^T x=y, \tag{6.6}$$

(6.4)式便可简写成

$$Py = \lambda y. \tag{6.7}$$

因A是对称的, 据(6.5)式可得

$$P^T = [L^{-1}A(L^{-1})^T]^T = L^{-1}A(L^{-1})^T = P.$$

因此, P也是一个对称矩阵. 这样, 广义特征值问题(6.1)就化为一个对称矩阵的特征值问题(6.7). 矩阵P的特征值 λ 就是所要求的特征值. 但是, 矩阵P的特征向量y则并不是原问题的特征向量. 据(6.6)式可知原问题的特征向量为

$$x = (L^T)^{-1} y.$$

解广义特征值问题(6. 1), 首先对矩阵B进行Cholesky分解 $B = LL^T$. 如果我们只要存放B的上三角部分的元素, 则可将第三章 § 2.3中计算L的元素 l_{ij} 的计算公式(2.17)改写成

$$l_{ij}=\begin{cases}\sqrt{b_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}^2},i=j;\\(b_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}l_{jk})/l_{ii},i<j;\\0,i>j.\end{cases}\tag{6.8}$$

其次, 还得计算矩阵

$$P=L^{-1}A(L^{-1})^T$$

为此, 先把它改写成

$$L^{-1}A=PL^T,\tag{6.9}$$

并令

$$L^{-1}A=X,$$

即

$$LX=A.\tag{6.10}$$

从而便可将(6.9)式写成 $PL^T = X.$ (6.11)

这样,计算P分成二步:先由(6.10)式计算X,后据(6.11)式计算P.

由(6.10)式所确定的矩阵X一般是非对称的.但对于计算对称矩阵P,只需计算其上三角部分或下三下角部分元素.矩阵A是对称的,如果我们只存放A的上三角部分元素,则仅计算X的上三角部分元素就够了.设$X=[x_{ij}]_{n\times n}$,$P=[p_{ij}]_{n\times n}$,据(1.10)式可推得

$$x_{ij}=\frac{a_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}x_{kj}}{l_{ii}},i\le j. \tag{6.12}$$

据(6.11)式,计算矩阵P的下三角部分元素的计算公式可写成

$$p_{ji}=\frac{x_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1}l_{jk}p_{ik}-\sum_{k=i}^{j-1}l_{jk}p_{ki}}{l_{jj}},\quad \begin{array}{l} i=1,\cdots,n, \\ j=i,\cdots,n. \end{array} \tag{6.13}$$

最后,计算得对称矩阵P的特征值,就是问题 $Ax=\lambda Bx$ 的特征值.

6.2 问题 $ABx=\lambda x$ 的特征值

若对正定矩阵B作出对称三角分解 $B=LL^T$ ，则(6.2)式可以写成

$$L^{-1}ALL^T x=\lambda L^T x. \tag{6.14}$$

令

$$Q=L^T AL, \tag{6.15}$$

$$L^T x=y, \tag{6.16}$$

则(6.14)式便可写成

$$Qy=\lambda y \tag{6.17}$$

显然Q是对称矩阵.因此,广义特征值问题(6.2)化为特征值问题(6.17).

计算Q可分两步:计算

$$Y=AL \tag{6.18}$$

和

$$Q = L^T Y. \tag{6.19}$$

因为矩阵Q是对称的,只要计算Q的下三角部分元素.因此,即使矩阵Y是非对称的,也只要计算Y的下三角部分就行了.

假定只存放A的上三角部分元素,记$Y=[y_{ij}]_{n\times n}$.据(6.18)式,容易推得计算矩阵Y的下三角部分元素的公式

$$y_{ij}=\sum_{k=j}^{i} a_{ki} l_{kj}+\sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} l_{kj},\quad \begin{array}{l} i=1,\cdots,n, \\ j=1,\cdots,i. \end{array} \tag{6.20}$$

记$Q=[q_{ij}]_{n\times n}$.据(6.19)式,计算Q的下三角部分元素的公式为

$$q_{ij}=\sum_{k=i}^{n} l_{ki} y_{kj},\quad \begin{array}{l} i=1,\cdots,n, \\ j=1,\cdots,i. \end{array} \tag{6.21}$$

6.3 问题 $Ax=\lambda Bx$ 和 $ABx=\lambda x$ 的特征向量

设矩阵

$$P=L^{-1}A(L^{-1})^{T}$$

的对应于特征值λ_j 的特征向量为

$$y=[y_{1j},\cdots,y_{nj}]^{T}$$

问题 $Ax=\lambda Bx$ 的相应特征向量为

$$x=[x_{1j},\cdots,x_{nj}]^{T}.$$

从(6.6)式可推得

$$x_{ij}=\frac{y_{ij}-\sum_{k=i+1}^{n}l_{ki}x_{kj}}{l_{ii}},i=n,\cdots,1. \tag{6.22}$$

据(6.16)式, 计算问题 $ABx=\lambda x$ 的特征向量的公式与(6.22)相同.