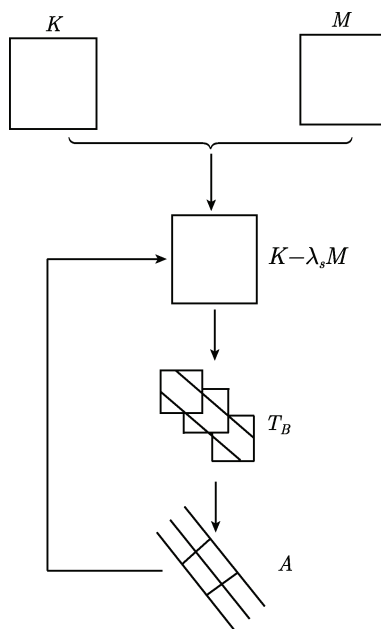


Lanczos 方法

演变与应用

Louis Komzsik 著

张 伟 廖本善 译



清华大学出版社

北 京

内 容 简 介

Lanczos方法是20世纪计算数学方向最有影响的方法之一,并且已经在工程中得到了广泛应用.

本书兼顾了Lanczos方法的理论演变和工程中的实际应用,其内容分为两部分:第一部分阐述了方法的演变,并提供了具体算法;第二部分讨论了工业中的实际应用,包括常用的模态分析、复特征值分析、频率响应分析以及线性系统问题的求解.对于应用数学和工业工程专业的研究人员,以及工程计算领域的工程师,本书是一本很有价值的参考书.

The Lanczos Method: Evolution and Application copyright © 2003 Society for Industrial and Applied Mathematics. Published by Tsinghua University Press with permission. Chinese edition copyright © 2011 by Tsinghua University Press.

版权所有,侵权必究.侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

Lanczos 方法:演变与应用/(美)科姆日克(Komzsik, L.)著;张伟,廖本善译. —北京:清华大学出版社,2011.3

书名原文: The Lanczos Method: Evolution and Application

ISBN 978-7-302-25271-9

I. ①L… II. ①科… ②张… ③廖… III. ①电子计算机-计算方法 IV. ①TP301.6
中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 060555 号

责任编辑:佟丽霞

责任校对:刘玉霞

责任印制:王秀菊

出版发行:清华大学出版社 地 址:北京清华大学学研大厦A座
http://www.tup.com.cn 邮 编:100084
社总机:010-62770175 邮 购:010-62786544
投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质量反馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印刷者:北京清华园胶印厂

装订者:

经 销:全国新华书店

开 本:170×230

印 张:6 字 数:106千字

版 次:2011年3月第1版

印 次:2011年3月第1次印刷

印 数:1-4 000

定 价:14.00元

产品编号:032543-01

献给斯特拉和维克多

中文版前言

本书最初为英文版,现在已经发行了日文版、匈牙利文版和朝鲜文版.十分感谢美国工业和应用数学学会和清华大学出版社为本书中文版的出版做出的努力.感谢我的同事廖本善博士和张伟博士,他们共同完成了中文版的翻译.希望本书能在中国学生和工程师的手中广为流传.

Louis Komzsik

2009

前 言

本书的专题——Lanczos 方法, 是 20 世纪下半叶计算数学方向最有影响的内容之一. 1950 年, Lanczos 在论文 [2] 中描述了这一方法. 当时在有限精度算术的计算机上实现时遇到了一些困难. 随着计算机技术的日新月异, 现在该方法已经可以在大量工程学上的计算问题中实际应用了. 鉴于 Lanczos 方法的应用范围十分广泛, 几乎不可能用一本书来完全描述, 因而本书只能选取其主干部分, 根据方法的演变来编排内容. 书中第一部分逐步建立了方法的理论框架, 并努力让读者了解其如何使用; 第二部分开始着手解决几类典型的工程分析问题.

我对 Lanczos 方法的了解始于 20 世纪 70 年代初期, 当时我在布达佩斯的 Eotvos 科学大学 (其前身是 Lanczos 的母校) 读研究生. 那时 Lanczos 的工作并没有得到赏识, 他的方法由于数值精度问题在某种程度上没有得到认可. 由于我热衷于 Lanczos 方法中简洁的三项递归关系式, 因而从那时起开始钻研这一方法. 直至 20 世纪 70 年代后期, Lanczos 方法在数值计算领域才确立了地位. 而到了 70 年代末, Lanczos 本人也在国际上享有了他应得的显著地位.

本书的题材源于过去 20 年我在各种讲座和研讨会上做的专题报告. 这些研讨会是由在美国、欧洲和远东地区行业领先的汽车企业和航空企业举办的, 出席会议的大多是工程师和计算机科学家. 他们希望了解 Lanczos 方法在商业有限元分析上的应用, 特别是在结构分析上的应用. 而当我以美国工业和应用数学学会讲师的身份在各学术单位作这些报告时, 参加者多是教师和学生. 他们更关心程序的实际执行和计算性能方面的问题. 这两类听众 (工业上和学术上) 的兴趣关注, 加之在该方法的演变上缺乏完整的文字描述, 促成我写作本书. 希望读者能和我共同分享、领略 Lanczos 方法演变的时间之旅, 并在书中找到适用于相应领域的具体算法.

本书分为两部分. 第一部分是第 1 章至第 5 章, 阐述 Lanczos 方法的演变. 书中从回顾经典的 Lanczos 方法开始, 直到演变为最先进的自适应方法. 第二部分是第 6 章至第 10 章, 强调该方法在工业上的实际应用. 具体来说, 第 7 章、第 8 章和第 9 章分别讨论在工业应用上经常涉及的模态分析、复数特征值分析和频率响应分析. 全书的最后还讨论了用 Lanczos 方法来求解线性系统问题的具体算法.

虽然描述 Lanczos 方法需要繁琐的数学理论, 但为了可读性, 本书省略了严格的定理和证明论述. 同样, 为了更专注主题, 本书也没有详细介绍算法中用到的数

值线性代数中的基础方法, 例如 QR 分解、奇异值分解以及 Givens 变换等. 书中几个章节提供了算法的部分程序编码, 以便读者能够运用 MATLAB 语言或其他高级程序设计语言来具体实现.

过去 25 年里, 我和一大批人在 Lanczos 方法的诸多层面进行过合作. 在此特别感谢加州大学伯克利分校的 Beresford Parlett 教授和斯坦福大学的 Gene Golub 教授, 感谢他们在理论上对我的巨大影响. 我很喜欢他们的书籍, 也十分乐于和他们探讨问题. 我也非常感激伯克利国家实验室的 Horst Simon 博士, 波音公司的 John Lewis 博士和加州大学戴维斯分校的 Zhaojun Bai 教授. 他们和我在 Lanczos 方法的实际应用上有非常重要的合作.

最后, 特别感谢我的同事 Tom Kowalski 博士, 他不仅参与了将本书提到的一些方法应用到工程软件 NASTRAN¹ 中的工作, 还完成了本书的校对, 并提供了宝贵的更正建议.

Louis Komzsik

2002

¹ NASTRAN 是美国国家航天航空局的注册商标.

目 录

I 演 变

第 1 章 经典的 Lanczos 方法	3
1.1 特征值问题	3
1.2 最小迭代法	4
1.3 特征值和特征向量的计算	6
1.4 几何解释	8
第 2 章 精确算术的 Lanczos 方法	10
2.1 计算公式	10
2.2 三对角问题的求解	12
2.3 精确算术算法	14
2.4 计算的例子	14
第 3 章 有限精度的 Lanczos 方法	20
3.1 Lanczos 程序的终止	20
3.2 测量和保持正交性	21
3.3 检收敛和估计的准确性	22
3.4 有限精度算法	23
第 4 章 分块实对称的 Lanczos 方法	25
4.1 分块的 Lanczos 方法	25
4.2 分块正交性的判别和保持	27
4.3 分块三对角形式的简化	28
4.4 分块实对称演算法	29
第 5 章 分块非对称的 Lanczos 方法	30
5.1 分块双正交的 Lanczos 方法	30
5.2 分块三对角问题的求解	31
5.3 误差分析	31
5.4 分块非对称算法	32
5.5 弹性分块大小	33

5.6	中断阻止	34
5.7	双正交性的保持	35

II 应 用

第 6 章	Lanczos 方法的工业应用	41
6.1	谱变换	41
6.2	频率域分解	43
6.3	几何域分解	43
6.3.1	矩阵分块	44
6.3.2	分块矩阵的分解	45
6.3.3	分块的回代	45
6.3.4	分块的 Lanczos 步骤	46
6.4	层次式的并行计算策略	47
第 7 章	自由无阻尼振动	49
7.1	机械系统的分析	49
7.2	广义线性特征值问题	51
7.3	常规模态分析应用	52
第 8 章	有阻尼自由振动	54
8.1	广义二次特征值问题	54
8.2	物理上解的重构	55
8.3	正交性分析	57
8.4	隐性乘法算子	58
8.5	隐性算子算法	59
8.6	复数特征值分析的应用	61
第 9 章	受迫振动分析	63
9.1	内部声学问题	63
9.2	流体-结构的相互作用	64
9.3	耦合受迫振动问题	66
9.4	运用 Lanczos 方法的 Padé 逼近	66
9.4.1	计算传递函数	67
9.4.2	近似传递函数	67
9.5	声学响应的应用	69

第 10 章 线性系统和 Lanczos 方法	71
10.1 精确解	71
10.2 近似解	71
10.3 递归近似解	73
10.4 Lanczos 线性求解算法	74
10.5 线性静态分析的应用	75
结束语	77
附录 Cornelius Lanczos 生平简介	78
图例	79
表格	80
参考文献	81

I 演 变

第1章 经典的 Lanczos 方法

在第二次世界大战期间, Lanczos 致力于求解特征值问题. 当时大多数求解这类问题的方法侧重于寻找矩阵的特征多项式, 以求得其特征值. Lanczos 的论文 [2] 中主要也是用到了这一方法, 但是在计算中注意减少舍入误差, 最终得到了最小迭代法 (The method of minimized iterations). 下面来回顾此方法, 以奠定本书的基础.

1.1 特征值问题

给定 n 阶实方阵 \mathbf{A} , 公式

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n a_{kl} x_k x_l \quad (1.1)$$

定义了一个二次型. 这是一个变量为 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 的连续函数, 加下划线是为与后文介绍的 Lanczos 向量区分. 如果矩阵 \mathbf{A} 是对称正定的, 则方程

$$\underline{\mathbf{x}}^T \mathbf{A} \underline{\mathbf{x}} = 1 \quad (1.2)$$

定义了一个 \mathbf{R}^n 上的 n 维椭球. 特征值问题就是去找椭球上的 n 个主轴. 这些主轴就是特征向量 $\underline{\mathbf{x}}_i, i = 1, 2, \dots, n$. 而主轴长度的倒数就是特征值 λ_i , 且满足方程

$$\mathbf{A} \underline{\mathbf{x}}_i = \lambda_i \underline{\mathbf{x}}_i. \quad (1.3)$$

这很容易证明, 因为椭球的主轴方向, 也就是从主轴位置指向表面的向量 $\underline{\mathbf{x}}_i$, 和曲面法线向量 $\underline{\mathbf{n}}$ 共线 (同方向), 即

$$\underline{\mathbf{x}}_i = c \underline{\mathbf{n}}, \quad (1.4)$$

这里 c 是一个常数. 因为法线方向指向梯度方向, 即

$$\underline{\mathbf{n}} = \nabla(\underline{\mathbf{x}}^T \mathbf{A} \underline{\mathbf{x}} - 1) = \mathbf{A} \underline{\mathbf{x}}_i, \quad (1.5)$$

由此推断 $c = 1/\lambda_i$.

1.2 最小迭代法

首先 Lanczos 考虑对称矩阵 ($\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$), 来求解特征多项式方程

$$G(\mu) = \det(\mathbf{A} - \mu\mathbf{I}) = 0, \quad (1.6)$$

即解

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mu\mathbf{u}, \quad (1.7)$$

其中 \mathbf{u} 称为特征向量, 而 μ 是其相应的特征值. 为了尊重 Lanczos 本人, 这里尽可能使用 Lanczos 的原始符号. 具体来说, 向量 \mathbf{b}_0 与自身做内积在现今的文献中常写成 $\mathbf{b}_0^T\mathbf{b}_0$, 但在下文中我们统一写成 \mathbf{b}_0^2 , 任意两个向量做内积也同样省去前面一个向量的转置符号.

Lanczos 解特征多项式的方法是通过生成一系列的尝试向量, 来生成一组前后依次相关的多项式. 从一个随机选取的向量 \mathbf{b} 开始, 下一个新的向量 \mathbf{b}_1 是选一个 \mathbf{b}_0 和 $\mathbf{A}\mathbf{b}_0$ 的线性组合

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{A}\mathbf{b}_0 - \alpha_0\mathbf{b}_0. \quad (1.8)$$

参数 α_0 的值是使 \mathbf{b}_1 与自身的内积

$$\mathbf{b}_1^2 = (\mathbf{A}\mathbf{b}_0 - \alpha_0\mathbf{b}_0)^2. \quad (1.9)$$

尽可能的小. 经运算得到

$$\alpha_0 = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_0)\mathbf{b}_0}{\mathbf{b}_0^2}. \quad (1.10)$$

新的向量 \mathbf{b}_1 和原来的向量 \mathbf{b}_0 是正交的. 这个性质很重要, 即

$$\mathbf{b}_1\mathbf{b}_0 = 0. \quad (1.11)$$

继续这个过程, 选取线性组合

$$\mathbf{b}_2 = \mathbf{A}\mathbf{b}_1 - \alpha_1\mathbf{b}_1 - \beta_0\mathbf{b}_0, \quad (1.12)$$

可以得到向量 \mathbf{b}_2 . 同样地, 这些系数要使 \mathbf{b}_2^2 最小. 通过运算可得

$$\alpha_1 = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_1)\mathbf{b}_1}{\mathbf{b}_1^2}, \quad \beta_0 = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_1)\mathbf{b}_0}{\mathbf{b}_0^2}. \quad (1.13)$$

因为

$$(\mathbf{A}\mathbf{b}_1)\mathbf{b}_0 = \mathbf{b}_1(\mathbf{A}\mathbf{b}_0) = \mathbf{b}_1^2, \quad (1.14)$$

新的向量 \mathbf{b}_2 同时正交 \mathbf{b}_1 和 \mathbf{b}_0 . 再继续这个过程, 需要计算

$$\mathbf{b}_3 = \mathbf{A}\mathbf{b}_2 - \alpha_2\mathbf{b}_2 - \beta_1\mathbf{b}_1 - \gamma_0\mathbf{b}_0. \quad (1.15)$$

然而, 由 \mathbf{b}_2 与前面两个向量正交 (orthogonality), 可以得到

$$\gamma_0 = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_2)\mathbf{b}_0}{\mathbf{b}_0^2} = \frac{\mathbf{b}_2(\mathbf{A}\mathbf{b}_0)}{\mathbf{b}_0^2} = 0. \quad (1.16)$$

Lanczos 的天才发现是, 每一步迭代只需要两个修正项, 这就是著名的三项递归式, 其步骤如下:

随机选取初始向量 \mathbf{b}_0 ,

$$\mathbf{b}_1 = (\mathbf{A} - \alpha_0\mathbf{I})\mathbf{b}_0,$$

$$\mathbf{b}_2 = (\mathbf{A} - \alpha_1\mathbf{I})\mathbf{b}_1 - \beta_0\mathbf{b}_0,$$

$$\mathbf{b}_3 = (\mathbf{A} - \alpha_2\mathbf{I})\mathbf{b}_2 - \beta_1\mathbf{b}_1,$$

⋮

$$\mathbf{b}_m = (\mathbf{A} - \alpha_{m-1}\mathbf{I})\mathbf{b}_{m-1} - \beta_{m-2}\mathbf{b}_{m-2} = 0.$$

当出现第 m 次递归式等于零时, 意味着到了最后一步. Lanczos 认为此时达到了最小多项式的秩 (order), 这里 $m \leq n$, n 是方阵 \mathbf{A} 的阶. 但是, 在有限精度运算情况下, 这一过程可能在得到最小多项式的秩之前, β_k 已经非常小, 且 $k < m$. 在 20 世纪 60 年代, 由于人们没有对这一现象充分地理解, 致使当时 Lanczos 方法在数值计算领域上没有太大的进展.

之后 Lanczos 将此方法应用于非对称矩阵, 同时对矩阵 \mathbf{A} 及其转置矩阵 \mathbf{A}^T 执行这个过程, 从而得到两组双正交向量, 这就是所谓的双正交过程 (bi-orthogonal process). 从任选两个向量 \mathbf{b}_0 和 \mathbf{b}_0^* 开始 (\mathbf{b}_0^* 是另一个初始向量, $\mathbf{b}_0^* \neq \mathbf{b}_0^H$), 第一步生成

$$\mathbf{b}_1 = \mathbf{A}\mathbf{b}_0 - \alpha_0\mathbf{b}_0, \quad (1.17)$$

$$\mathbf{b}_1^* = \mathbf{A}^T\mathbf{b}_0^* - \alpha_0\mathbf{b}_0^*, \quad (1.18)$$

其中 α_0 满足双正交条件

$$\alpha_0 = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_0)\mathbf{b}_0^*}{\mathbf{b}_0\mathbf{b}_0^*} = \frac{(\mathbf{A}^T\mathbf{b}_0^*)\mathbf{b}_0}{\mathbf{b}_0^*\mathbf{b}_0}. \quad (1.19)$$

第二步产生

$$\mathbf{b}_2 = \mathbf{A}\mathbf{b}_1 - \alpha_1\mathbf{b}_1 - \beta_0\mathbf{b}_0, \quad (1.20)$$

$$\mathbf{b}_2^* = \mathbf{A}^T\mathbf{b}_1^* - \alpha_1\mathbf{b}_1^* - \beta_0\mathbf{b}_0^*, \quad (1.21)$$

其中 α_1 和 β_0 满足

$$\alpha_1 = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_1)\mathbf{b}_1^*}{\mathbf{b}_1\mathbf{b}_1^*} = \frac{(\mathbf{A}^T\mathbf{b}_1^*)\mathbf{b}_1}{\mathbf{b}_1^*\mathbf{b}_1}, \quad (1.22)$$

$$\beta_0 = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_1)\mathbf{b}_0^*}{\mathbf{b}_1\mathbf{b}_0^*} = \frac{(\mathbf{A}^T\mathbf{b}_1^*)\mathbf{b}_0}{\mathbf{b}_0^*\mathbf{b}_0} = \frac{\mathbf{b}_1^*\mathbf{b}_1}{\mathbf{b}_0^*\mathbf{b}_0}. \quad (1.23)$$

继续这一过程, 得到如下多项式:

$$p_0 = 1,$$

$$p_1(\mu) = \mu - \alpha_0,$$

$$p_2(\mu) = (\mu - \alpha_1)p_1(\mu) - \beta_0p_0(\mu),$$

$$\vdots$$

$$p_n(\mu) = (\mu - \alpha_{n-1})p_{n-1}(\mu) - \beta_{n-2}p_{n-2}.$$

为了简便起见, 假设所有的多项式直到 n 次都可由这一过程达到 (没有任何一个 β_i 的值等于零), 则 p_n 是 \mathbf{A} 的特征多项式, 其根为 $\mu_i, i = 1, 2, \dots, n$.

1.3 特征值和特征向量的计算

Lanczos 使用上述特征多项式和双正交序列 $\{\mathbf{b}_i\}, \{\mathbf{b}_i^*\}$ 来找用这些向量表示的特征向量. 假设矩阵 \mathbf{A} 是满秩的, 则向量 \mathbf{b}_i 可以表示为特征向量的线性组合

$$\mathbf{b}_i = p_i(\mu_1)\mathbf{u}_1 + p_i(\mu_2)\mathbf{u}_2 + \dots + p_i(\mu_n)\mathbf{u}_n. \quad (1.24)$$

将 \mathbf{b}_i 和 \mathbf{u}_k^* 做内积, 其中向量 \mathbf{u}_k^* 和向量 \mathbf{u}_i 是正交的, 可以得到

$$\mathbf{b}_i\mathbf{u}_k^* = p_i(\mu_k)\mathbf{u}_k\mathbf{u}_k^*. \quad (1.25)$$

因为其他的所有内积都为零. 请注意 $\mathbf{u}_k^* \neq \mathbf{u}_k^H$, 它们只是分别作为两个同时生成的序列的第 k 次项. 反过来, 如果将向量 \mathbf{u}_i 用向量 \mathbf{b}_i 来表示, 则有

$$\mathbf{u}_i = \alpha_{i,0}\mathbf{b}_0 + \alpha_{i,1}\mathbf{b}_1 + \dots + \alpha_{i,n-1}\mathbf{b}_{n-1}. \quad (1.26)$$

得到

$$\mathbf{T}\mathbf{v} = \mu\mathbf{v}, \quad (1.37)$$

其中

$$\mathbf{v} = (\mathbf{B}^*)^T \mathbf{u}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{B}\mathbf{v}. \quad (1.38)$$

上述方法仍是现今最常用的算法: 先计算三对角矩阵 \mathbf{T} 的特征向量 \mathbf{v} , 然后左乘 Lanczos 向量以得到原矩阵的特征向量.

1.4 几何解释

为更深刻地了解此方法, 让我们再次考虑对称情况. 假设已经找到了两个 Lanczos 向量 $\mathbf{b}_0, \mathbf{b}_1$, 且它们生成一个平面 S , 即

$$S = \text{span}(\mathbf{b}_0, \mathbf{b}_1). \quad (1.39)$$

下面寻求第三个 Lanczos 向量. 向量 $\mathbf{A}\mathbf{b}_1$ 在这个平面上的投影可写成

$$\text{proj}_S(\mathbf{A}\mathbf{b}_1) = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_1)\mathbf{b}_0}{\mathbf{b}_0\mathbf{b}_0}\mathbf{b}_0 + \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_1)\mathbf{b}_1}{\mathbf{b}_1\mathbf{b}_1}\mathbf{b}_1, \quad (1.40)$$

或者

$$\text{proj}_S(\mathbf{A}\mathbf{b}_1) = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_1)\mathbf{b}_0}{\mathbf{b}_0^2}\mathbf{b}_0 + \frac{(\mathbf{A}\mathbf{b}_1)\mathbf{b}_1}{\mathbf{b}_1^2}\mathbf{b}_1. \quad (1.41)$$

根据方程 (1.13) 可得

$$\text{proj}_S(\mathbf{A}\mathbf{b}_1) = \beta_0\mathbf{b}_0 + \alpha_1\mathbf{b}_1. \quad (1.42)$$

从向量 $\mathbf{A}\mathbf{b}_1$ 中去除上述投影分量, 得到的向量是与上述投影正交的, 选它为第三个 Lanczos 向量:

$$\mathbf{b}_2 = \mathbf{A}\mathbf{b}_1 - \text{proj}_S(\mathbf{A}\mathbf{b}_1) = \mathbf{A}\mathbf{b}_1 - \alpha_1\mathbf{b}_1 - \beta_0\mathbf{b}_0 \quad (1.43)$$

这与公式 (1.12) 相同, 并再次给出了 Lanczos 方法的实现过程.

一般情况下, Lanczos 方法的每一个步骤, 就是将向量 $\mathbf{A}\mathbf{b}_j$ 投影到前面已有的 Lanczos 向量所生成的子空间, 然后去除 $\mathbf{A}\mathbf{b}_j$ 在这个子空间的投影分量, 从而得到与这个子空间正交的部分, 记为 \mathbf{b}_{j+1} , 于是得到了一个新的 Lanczos 向量 \mathbf{b}_{j+1} . 具体来说, 有

$$\mathbf{B}_j = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_0 & \mathbf{b}_1 & \cdots & \mathbf{b}_j \end{bmatrix}, \quad (1.44)$$

$$S_j = \text{span}(\mathbf{B}_j), \quad (1.45)$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{A}\mathbf{b}_j, \quad (1.46)$$

$$\mathbf{p} = \text{proj}_{S_j} \mathbf{a}, \quad (1.47)$$

$$\mathbf{b}_{j+1} = \mathbf{a} - \mathbf{p}. \quad (1.48)$$

第一部分其余章节描述了此方法的演变, 直至近年来新发展的用于工业问题的 Lanczos 公式.

后面章节中, 我们不再使用 Lanczos 的原始符号, 一方面是为了寻求便利, 另一方面也是为了和现代文献一致.

第2章 精确算术的 Lanczos 方法

为了奠定以下章节循序渐进讨论的基础, 本章首先回顾精确算术上的 Lanczos 方法, 然后出于前后一致的考虑, 重述特征值问题并给出一个更适合计算的方法.

2.1 计算公式

特征值问题是求解方程

$$\underline{\mathbf{A}}\underline{\mathbf{x}} = \lambda\underline{\mathbf{x}}, \quad \underline{\mathbf{y}}^T \underline{\mathbf{A}} = \lambda\underline{\mathbf{y}}^T, \quad (2.1)$$

其中 $\underline{\mathbf{A}}$ 是非对称实矩阵. 在这里及本书以下章节, $\underline{\mathbf{x}}, \underline{\mathbf{y}}$ 是原来问题的特征向量, 下划线是用来和 Lanczos 向量相区分.

Lanczos 方法生成了两组双正交的向量 \mathbf{X}_n 和 \mathbf{Y}_n (在经典方法中是向量 \mathbf{b}_i 和 \mathbf{b}_i^*), 使得

$$\mathbf{Y}_n^T \mathbf{X}_n = \mathbf{I}, \quad (2.2)$$

其中 \mathbf{I} 是一个 n 阶单位矩阵, 且

$$\mathbf{Y}_n^T \underline{\mathbf{A}} \mathbf{X}_n = \mathbf{T}_n, \quad (2.3)$$

这里 $\underline{\mathbf{A}}$ 是最初的非对称实矩阵, \mathbf{T}_n 是一个三对角矩阵. 通过适当的左乘和右乘矩阵, 可以得到以下两个方程:

$$\underline{\mathbf{A}} \mathbf{X}_n = \mathbf{X}_n \mathbf{T}_n, \quad (2.4)$$

$$\mathbf{Y}_n^T \underline{\mathbf{A}} = \mathbf{T}_n \mathbf{Y}_n^T. \quad (2.5)$$

将这两个方程以列的形式描述, 得到

$$\underline{\mathbf{A}} \mathbf{x}_k = \gamma_{k-1} \mathbf{x}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{x}_k + \beta_k \mathbf{x}_{k+1}, \quad (2.6)$$

$$\mathbf{y}_k^T \underline{\mathbf{A}} = \beta_{k-1} \mathbf{y}_{k-1}^T + \alpha_k \mathbf{y}_k^T + \gamma_k \mathbf{y}_{k+1}^T. \quad (2.7)$$

其中 \mathbf{y}_k 和 \mathbf{x}_k 分别是 \mathbf{Y}_n 和 \mathbf{X}_n 的第 k 个列, $k = 1, 2, \dots, n-1$. 对于任意的 k ($k < n$), 公式

$$\underline{\mathbf{A}} \mathbf{X}_k = \mathbf{X}_k \mathbf{T}_k + \beta_k \mathbf{x}_{k+1} \mathbf{e}_k^T, \quad (2.8)$$