反对称矩阵的一种计算方法*

钟万勰　　　　钟翔翔
(大连理工大学工程力学研究所，116024)　　(纽约州立大学石溪分校应用数学系)

摘　要　本文讨论反对称矩阵的数值计算问题. 指出联立方程求解可以用分块矩阵 LDL^T 算法. 对于反对称阵的辛本征问题论述了辛雅可比算法，辛 Householder 变换，分块三对角化等. 对最优控制、结构力学、波的传播等，是一种好的算法.

关键词　反对称矩阵，辛本征问题.
分类号　AMS(1991) 65F30/CCL O241.6

1　反对称矩阵的三角化分解及反对称胞块的三对角化分解

反对称矩阵的计算在结构力学问题中有广泛的应用，见[1－8]. 一般说来，矩阵计算大体上可划分为联立方程求解及特征问题两大类.

设

$$J_n = \begin{bmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{bmatrix}\begin{matrix} n \\ n \end{matrix}, \tag{1.1}$$

在计算上，J_n 经重新编排后成为

$$J'_n = \mathrm{diag}(J_1, J_1, \cdots, J_1),\ 共\ n\ 个\ J_1, \tag{1.2}$$

这相当于将 $2n\times 2n$ 矩阵看成以 2×2 分块子矩阵(称为胞块(cell))作为元素的 $n\times n$ 胞块矩阵，J_1 相当于单位元素.

任一 $2n\times 2n$ 反对称阵 A，经行列变换后，总可以分解为

$$A = LD_JL^T, \tag{1.3}$$

其中 L 是胞块下三角阵，其对角胞块为 I_2；D_J 为对角胞块阵

$$D_J = \mathrm{diag}(d_1J_1, \cdots, d_nJ_1), \tag{1.4}$$

$d_i\ (i=1,\cdots,n)$ 是纯量. 显然 LD_JL^T 是反对称的，$(LD_JL^T)^T = LD_J^TL^T = -(LD_JL^T)$. 在分解算法中，我们选择对角大胞块换行换列. 分解的计算公式与对称阵的 LDL^T 算法几乎相同.

当 $j<i$ 时，

$$L_{ij} = [A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik}D_{Jk}L_{jk}^T]D_{Jj}^{-1}; \tag{1.5a}$$

* 1992年8月11日收到. 94年3月29日收到修改稿. 国家自然科学基金和教委博士点基金资助课题.

当 $j=i$ 时，

$$D_{J_i} = [A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik} D_{J_k} L_{ik}^T]. \tag{1.5b}$$

回代求解的算法与对称阵时也一样.

类同于对称阵时的 Householder 正交变换阵，可构成辛矩阵

$$S_k = I_{2n} - 2J_n' w (w^T J_n' w)^{-1} w^T \tag{1.6}$$

其中 w 是以胞块为元素的 n 维胞块向量，实际是 $2n\times 2$ 的阵. 可以验明 $S_k^T J_n' S_k = J_n'$，S_k 阵称为辛-Householder 变换阵，或称 SH 类矩阵.

SH 变换的一个主要用途是将反对称阵 A 胞块三对角化，即寻找 S 阵使

$$S^T A S = A_{3d}, \tag{1.7}$$

其中 A_{3d} 是胞块三对角线反对称阵. S 阵可通过一系列 SH 变换之积来组成. 在执行三对角化时也涉及到选大元与行列变换的问题.

三对角线胞块可以用 $n-2$ 步 SH 变换完成. 设通过 $r-1$ 步 SH 变换，A 阵已成为 A_r 阵，其中前 $r-1$ 的胞块行与列已完成了三对角线化. 现在要寻找 S_r 阵以执行变换

$$A_{r+1} = S_r^T A_r S_r \tag{1.8}$$

以使第 r 行与列也三对角线化，而前 $(r-1)$ 行与列则不变. S_r 可以由 4 个子变换构成. 先对于枢轴胞块 $(r+1,r)$，

$$a_{r+1,r}^{(r)} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{bmatrix}, \tag{1.9}$$

式中 $a_1 \sim a_4$ 为实数，用对角胞块辛阵 S_d 作规格化

$$A_{\text{normal}} = S_d^T A_r S_d. \tag{1.10}$$

除 $(r+1)$ 的对角胞块外，S_d 是一个单位阵. 其对角胞块为

$$S_{d,r+1,r+1} = \begin{bmatrix} -\operatorname{sign}(\Delta) a_3 & -a_4 \\ \operatorname{sign}(\Delta) a_1 & a_2 \end{bmatrix} / \sqrt{|\Delta|}, \quad \Delta = a_1 a_4 - a_2 a_3. \tag{1.11}$$

A_{normal} 阵的枢轴胞块成为

$$J_1 \times \sqrt{\Delta} \text{ 当 } \Delta > 0 \text{ 时；或 } K_1 \times \sqrt{-\Delta} \text{ 当 } \Delta < 0 \text{ 时} \tag{1.12}$$

以后下标 normal 不再标记. 在规格化时应对于 r 列胞块作 $|\Delta|$ 的选大，再换行换列的.

规格化后可先消去 r 胞块列中的左数列，变换阵 S_{rl} 可由 (1.6) 的 SH 变换来组成，取

$$w_{rl}^T = [0, \cdots, \overset{\downarrow r}{0}, a_{r+1,r}^{(r)T} \times (1+\sigma), a_{r+2,r}^{(r)T}, \cdots, a_{n,r}^{(r)T}], \tag{1.13}$$

其中 a 是胞块，σ 为待定参数，可选为 $\sigma=1$. 由于已执行 S_d 变换 的规格化，$a_{r+1,r}^{(r)}$ 的枢轴块已由 (1.12) 式给出；其后的非枢轴块可选取 A_r 中相应胞块的左列而将其右侧元素取零. 即设如规格化后的胞块

$$\bar{a}_{i,r}^{(r)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix},$$

则取

$$a_{i,r}^{(r)} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 \\ a_{21} & 0 \end{bmatrix}, \qquad i > r+1. \tag{1.14}$$

将如此构造的 w_{rl} 替代(1.6)中的 w 就组成 S_{rl} 阵，它的前 r 行与列胞块除对角胞为单位阵 I_2 外皆为零阵；因(1.14)的选择，只有 $(r+1)$ 行与列才可能不同于单位阵. 并且 $(r+1)$ 对角胞块为 $-I_2$，这是因为规格化后枢轴块由(1.12)给出. 可导出

$$J_1 d = \sum_{i=r+1}^{n} a_{i,r}^{(r)T}\cdot J_1\cdot a_{i,r}^{(r)} = a_{r+1,r}^{(r)T} J_1 a_{r+1,r}^{(r)},\ w_{rl}^T J_s' w_{rl} = J_1 d(1+\sigma)^2 = 4J_1 d,$$

并且还可导出 S_{rl} 阵的第 $(r+1)$ 列胞块，只有左列才不是零；第 $(r+1)$ 行则只有第 2 行才有数值. 请见后文数例(1.16)式. 由于 S_{rl} 的这种突出特点，由它执行的相合变换 $A_{r+1}^{(l)}=S_{rl}^T A_r S_{rl}$ 就可将 $A_{r+1}^{(l)}$ 阵的第 r 列胞块的左列变换成零，证明略.

当利用 S_{rl} 阵将 r 列胞块的左列消元之后，应当再作一次规格化，其手续与上文 S_4 一样；然后再利用 SH 变换进一步将 r 列胞元的右列消去，其方法与 S_{rl} 阵很相近，详情略去. 这样，消去 r 列胞元成为三对角线是通过 4 个简单的辛变换顺次完成的. 它们的合成已不是单纯的 SH 变换了. 例如：设 $n=4$，A 阵为

$$A=\left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc}
0 & 2.0 & -5.0 & -17.0 & -4.0 & -2.0 & -2.0 & -1.0\\
-2.0 & 0 & -6.0 & -8.0 & -2.0 & -2.0 & -6.0 & 4.0\\
\hline
5.0 & 6.0 & 0 & 10.0 & -5.0 & 2.0 & 0 & -2.0\\
17.0 & 8.0 & -10.0 & 0 & -6.0 & -4.0 & -2.0 & 0\\
\hline
4.0 & 2.0 & 5.0 & 6.0 & 0 & 4.0 & 4.0 & 0\\
2.0 & 2.0 & -2.0 & 4.0 & -4.0 & 0 & 0 & -4.0\\
\hline
2.0 & 6.0 & 0 & 2.0 & -4.0 & 0 & 0 & 4.0\\
1.0 & -4.0 & 2.0 & 0 & 0 & 4.0 & -4.0 & 0
\end{array}\right) \tag{1.15}$$

现要显示其第 1 列脆块消元过程. S_4 规格化改变了第 2 行、列

$$\left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc}
0 & 2.0 & 0 & -7.874 & -4.0 & -2.0 & -2.0 & -1.0\\
-2.0 & 0 & -7.874 & 0 & -2.0 & -2.0 & -6.0 & 4.0\\
\hline
0 & 7.874 & 0 & 10.0 & -6.985 & 6.858 & 1.270 & -4.318\\
7.874 & 0 & -10.0 & 0 & 0.508 & -5.080 & -1.524 & 2.032\\
\hline
4.0 & 2.0 & 6.985 & -0.508 & 0 & 4.0 & 4.0 & 0\\
2.0 & 2.0 & -6.858 & 5.080 & -4.0 & 0 & 0 & -4.0\\
\hline
2.0 & 6.0 & -1.270 & 1.524 & -4.0 & 0 & 0 & 4.0\\
1.0 & -4.0 & 4.318 & -2.032 & 0 & 4.0 & -4.0 & 0
\end{array}\right)$$

为消去其第 1 列胞块的左列，其变换阵为

$$S_{rl}=\left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc}
1.0 & 0 & & & & & & \\
0 & 1.0 & & & & & & \\
\hline
 & & -1.0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
 & & 0 & -1.0 & -0.508 & -0.254 & -0.254 & -0.127\\
\hline
 & & -0.254 & 0 & 1.0 & 0 & & \\
 & & 0.508 & 0 & 0 & 1.0 & & \\
\hline
 & & -0.127 & 0 & & & 1.0 & 0\\
 & & 0.254 & 0 & & & 0 & 1.0
\end{array}\right) \tag{1.16}$$

经此变换后，A 阵修改为

$$
\left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc}
0 & 2.0 & 0 & 7.874 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-2.0 & 0 & 9.144 & 0 & -2.0 & -2.0 & -6.0 & 4.0 \\
\hline
0 & -9.144 & 0 & 8 & 9.525 & -4.826 & -1.270 & 2.794 \\
-7.874 & 0 & -8 & 0 & -0.508 & 5.080 & 1.524 & -2.032 \\
\hline
0 & 2.0 & -9.525 & 0.508 & 0 & 6.710 & 4.903 & -0.968 \\
0 & 2.0 & 4.826 & -5.080 & -6.710 & 0 & -0.903 & -5.161 \\
\hline
0 & 6.0 & 1.270 & -1.524 & -4.903 & 0.903 & 0 & 3.290 \\
0 & -4.0 & -2.794 & 2.032 & 0.968 & 5.161 & -3.290 & 0
\end{array}\right)
$$

再经规格化，并消去第 1 列胞块的右列，A 阵进一步改为

$$
\left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc}
0 & 2.0 & 0 & 8.485 & & & & \\
-2.0 & 0 & 8.485 & 0 & & & & \\
\hline
0 & -8.485 & 0 & 9.861 & 8.839 & -4.478 & -1.179 & 2.593 \\
-8.485 & 0 & -9.861 & 0 & 0.337 & 0.656 & -1.635 & 1.896 \\
\hline
 & & -8.839 & -0.337 & 0 & 3.571 & -1.625 & 3.810 \\
 & & 4.478 & -0.656 & -3.571 & 0 & 1.986 & -6.661 \\
\hline
 & & 1.179 & 1.635 & 1.625 & -1.986 & 0 & 4.568 \\
 & & -2.593 & -1.896 & -3.810 & 6.661 & -4.568 & 0
\end{array}\right)
$$

2 SL 迭代算法

反对称阵的 SL 迭代类同于对称阵的 QL 算法. 当然变换阵 S 应当是辛矩阵. 如果取辛矩阵 S_s，使其对反对称阵 A_s 有 $A_sS_s=L_s$，再计算

$$A_{s+1}=S_s^TL_s=(S_s^TA_sS_s) \tag{2.1}$$

其中 L_s 为胞块下三角阵，s 为迭代次数，这就构成了 SL 算法的一次迭代. 恰当地选择 S_s 阵进行逐次 SL 迭代，可使矩阵 A_s 逐步逼近于胞块对角反对称阵，从而，如同处理对称阵 QL 算法那样，可以求出特征值与特征向量.

对于三对角线的胞块 A 阵，S_s 可进一步分解为

$$S_s=S_1^*\times S_2^*\times\cdots\times S_{n-1}^* \tag{2.2}$$

其中 S_i^* 的寻求次序是 $i=1,2,\cdots,n-1$. S_i^* 的作用是将上对角线胞块 $(i,i+1)$ 消去，其本身只有 $P_1,\cdots,P_4$ 4 个胞块待定，应满足

$$P_1^TJ_1P_1+P_3^TJ_1P_3=J_1,\quad P_2^TJ_1P_2+P_4^TJ_1P_4=J_1,\quad P_1^TJ_1P_2+P_3^TJ_1P_4=0. \tag{2.3}$$

的辛阵条件. 在下式的乘法中，N，βJ_1 胞块是原有的，而 αD_i 与 W 是由上一次 $A_{i-1}^*\times S_{i-1}^*$ 的计算得出的. 当 $i=2$ 时

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline \Delta & & & & \\ \hline \Delta & \alpha D_i & N & & \\ \hline \Delta & w & \beta J_1 & * & \\ \hline & & * & * & * \\ \hline & & & * & * \\ \hline \end{array} \times \begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline I_2 & & & & \\ \hline & P_1 & P_2 & & \\ \hline & P_3 & P_4 & & \\ \hline & & & I_2 & \\ \hline & & & & I_2 \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline \Delta & & & & \\ \hline \Delta & \Delta & & & \\ \hline \Delta & \Delta & \Delta & * & \\ \hline & \Delta & \Delta & * & * \\ \hline & & & * & * \\ \hline \end{array}$$

$$A_2^* \qquad \times \qquad S_2^* \qquad = \qquad A_3^*$$

注：*—未修改过；Δ—修改过；空—零阵，$n=5$.

A_i^* 阵自$(i+1)$列往后尚未修改过，与 A_1^* 一样；α 是实数而

$$D_i = K_1 \text{ 或 } J_1. \tag{2.4}$$

每一步 S_i^* 的 $P_1 \sim P_4$ 阵在(2.3)条件下有许多选择余地，按上三角化的要求可以执行如下，先计算 γ^2

$$\det(\det(D_i)WD_iN + \alpha\beta J_1)(\alpha^2 + \det(D_iN))^{-1} = \pm\gamma^2, \tag{2.5}$$

当上式左侧取正号时，$D_{i+1}=J_1$，否则 $D_{i+1}=K_1$；然后

$$\left.\begin{array}{l} P_4 = [\frac{1}{\alpha}\det(D_i)WD_iN + \beta J_1]^{-1}D_{i+1}\cdot\gamma,\ P_1 = P_4 \\ P_2 = \alpha^{-1}\det(D_i)D_iNP_4,\ P_3 = \alpha^{-1}\det(D_i)J_1N^TD_i^TJ_1P_1 \end{array}\right\}, \tag{2.6}$$

至此 S_i^* 已经形成. 通过逐个乘以 $S_1^*,\cdots,S_{n-1}^*$，就将三对角线胞块阵化为下三角的三对角线胞块阵 L_n. 然后再左乘 $S_n^T=(S_{n-1}^{*T}\times\cdots\times S_1^{*T})$，就得到 A_{n+1}，它仍是三对角线反对称胞块阵，这个情况与对称阵的 QL 算法[3]类同.

在执行 SL 算法之前，可以先用式(1.10)～(1.12)予以规格化，从而使计算简化. SL 算法一般总是收敛的. 作者将另文论述，通过适当的移轴变换，可以加速其收敛性.

参 考 文 献

[1] Zhong Wanxie and Zhong Xiangxiang, *Computational structural mechanics optimal control and semi-analytical method for PDE*, Computers and Structures, 37, 993—1004, 1990.

[2] Zhong Wanxie and Zhong Xiangxiang, *Elliptic partial differential equation and optimal control*, Numerical Methods for PDE, 8(2): 149—169, 1992.

[3] Zhong Wanxie、Lin Jiahao、Qiu Chunhang, *Computational structural mechanics and optimal control*, Int. J. Num. Meth. In Eng, 33, 197—211, 1992.

[4] 钟万勰, 条形域平面弹性问题与哈密尔顿体系, 大连理工大学学报 31 卷, 373—384, 1991.

[5] Zhong Wanxie、Yang Zaishi, *Partial differential equations and Hamiltonian system*, Proc. SINO-US Joint Symposium on Computational Mechanics in Structural Engineering, Beijing, Sept. 1991. Computational Mechanics in Structural Engineering, 23—27, Elsevier.

[6] C. F. Van Loan, *A symplectic method for approximating all the eigenvalues of a Hamiltonian matrix*, Linear Algeb and Appl., Vol. 61, 223—251, 1984.

[7] Y. Yong, Y. K. Lin, *Wave propagation for truss type structural networks*. Proc. AIAA/ASME/ASCE/AHS/ACS

31st. Structures, Structural Dynamics and Material Conference, Calif., Apr. 1990, paper AIAA—90—1082—CP, 2026—2035.

[8] D. W. Miller, A. H. Von Flotow, *A travelling wave approach to power flow in structural networks*, Journ. Sound Vib., 128, 145—162, 1989.

On the Computation of Skew-symmetric Matrices

Zhong Wanxie

(Research Inst. of Eng. Mech., Dalian Univ. of Tech., PRC)

Zhong Xiangxiang

(Dept. Appl. Math. Statis., State Univ of New York. Stony Brook, NY, USA)

Abstract

The importance of skew-symmetric matrix computation is pointed out for optimal control, structural mechanics and wave propagation problems first, then the close relation between skew-symmetric matrix and the symplectic geometry is explained. The simultaneous equations can be solved by the cell matrix LDL^T factorization method. To the symplectic eigenproblem, the symplectic Jacobian algorithm, the symplectic Householder transformation, cell tridiagonalization and cell symplectic SL algorithm are given for the skew-symmetric matrices.

Keywords skew-symmetric matrix, symplectic eigenproblem.