计算方法及 MATLAB 实现

郑勋烨 编著

主审: 高世臣 褚宝增 王祖朝 王翠香

副审: 李少琪 李明霞 赵琳琳 赵俊芳

国防工业出版社

第七章 矩阵特征值计算

7.1 幂法和反幂法 (Power Method)

7.1.1 幂法

幂法 (Power Method) 和反幂法 (Inverse Power Method) 是利用迭代序列计算矩阵 A 和非奇异矩阵的逆矩阵 A^{-1} 的主特征值 和 主特征向量 的方法. 它们本质上都是属于 迭代方法. 与之相对的则是 变换方法,包括著名的 Householder方法和 QR 方法等等.

【 定义 1. 主特征值和主特征向量 】

矩阵 $A = (a_{ij})_{n \times n} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的所有特征值依照模从大到小的次序排列为

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge \dots \ge |\lambda_n| \ge 0$$

则矩阵 A 的 主特征值 正是矩阵 A 的模极大的特征值 λ_1 . 它的模 <u>严格大于</u> 序列后面的所有特征值的模. 矩阵 A 的 主特征值 λ_1 对应的特征向量 v_1 称为矩阵 A 的 主特征向量.

倘若矩阵 A 的模极大的特征值 λ_1 是 r 重根,所有特征值依 照模从大到小的次序排列为

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| = \dots = |\lambda_r| > |\lambda_{r+1}| \ge \dots \ge |\lambda_n| \ge 0$$

则 主特征值 λ_1 对应的 r 个线性无关特征向量 v_1, v_2, \dots, v_r 称为矩阵 A 的 主特征向量.

【 幂法 (Power Method) 的引人 】

由于矩阵 A 的所有特征值对应的线性无关特征向量系

$$v_1, v_2, \cdots, v_n$$

可以构成向量空间 R^n (或 C^n) 的标准正交基. 对于任意非零实向量 $x_0 \neq 0 \in R^n$ (或非零复向量 $x \neq 0 \in C^n$),我们有在这个基下的线性组合表示

$$x_0 = c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n, \qquad c_1^2 + c_2^2 + \dots + c_n^2 > 0$$

此时 以矩阵 A 为迭代映射 构造迭代序列

$$x_{1} = Ax_{0} = c_{1}Av_{1} + c_{2}Av_{2} + \dots + c_{n}Av_{n}$$

$$= c_{1}\lambda_{1}v_{1} + c_{2}\lambda_{2}v_{2} + \dots + c_{n}\lambda_{n}v_{n}$$

$$x_{2} = Ax_{1} = A^{2}x_{0} = c_{1}\lambda_{1}^{2}v_{1} + c_{2}\lambda_{2}^{2}v_{2} + \dots + c_{n}\lambda_{n}^{2}v_{n}$$

$$\vdots$$

$$x_{k} = Ax_{k-1} = A^{k}x_{0} = c_{1}\lambda_{1}^{k}v_{1} + c_{2}\lambda_{2}^{k}v_{2} + \dots + c_{n}\lambda_{n}^{k}v_{n}$$

$$x_{k+1} = Ax_{k} = A^{k+1}x_{0}$$

$$= c_{1}\lambda_{1}^{k+1}v_{1} + c_{2}\lambda_{2}^{k+1}v_{2} + \dots + c_{n}\lambda_{n}^{k+1}v_{n}$$

对于一般的第k步迭代表达式,我们提取出公因子 λ_1^k ,则有

$$x_{k} = Ax_{k-1} = A^{k}x_{0} = c_{1}\lambda_{1}^{k}v_{1} + c_{2}\lambda_{2}^{k}v_{2} + \dots + c_{n}\lambda_{n}^{k}v_{n}$$

$$= \lambda_{1}^{k} [c_{1}v_{1} + c_{2}(\frac{\lambda_{2}}{\lambda_{1}})^{k}v_{2} + \dots + c_{n}(\frac{\lambda_{2}}{\lambda_{1}})^{k}v_{n}]$$

$$= \lambda_{1}^{k} [c_{1}v_{1} + \sum_{j=2}^{n} c_{j}(\frac{\lambda_{j}}{\lambda_{1}})^{k}v_{j}]$$

$$= \lambda_{1}^{k} [c_{1}v_{1} + \varepsilon_{k}]$$

其中 $\varepsilon_k = \sum_{j=2}^n c_j (\frac{\lambda_j}{\lambda_1})^k v_j$. 由于 $|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge \dots \ge |\lambda_n|$, 故而 $|\frac{\lambda_j}{\lambda_1}| < 1$. 于是

$$\varepsilon_k = \sum_{j=2}^n c_j (\frac{\lambda_j}{\lambda_1})^k v_j \longrightarrow 0, \quad k \longrightarrow +\infty$$

从而

$$\lim_{k \longrightarrow +\infty} \frac{x_k}{\lambda_1^k} = \lim_{k \longrightarrow +\infty} [c_1 v_1 + \varepsilon_k] = c_1 v_1$$

换言之, 当 $k \longrightarrow +\infty$ 充分大时, 向量

$$x_k \approx c_1 \lambda_1^k v_1$$

亦即迭代向量 x_k 可以作为矩阵 A 的 主特征值 λ_1 对应的 主特征向量 v_1 的 近似向量.

对于 A 的 主特征值 λ_1 的计算, 我们如下进行. 由

$$\begin{cases} x_k = \lambda_1^k [c_1 v_1 + \varepsilon_k] = (x_k^{(1)}, x_k^{(2)}, \dots, x_k^{(n)}) \\ x_{k+1} = \lambda_1^{k+1} [c_1 v_1 + \varepsilon_{k+1}] = (x_{k+1}^{(1)}, x_{k+1}^{(2)}, \dots, x_{k+1}^{(n)}) \end{cases}$$

对于向量的第 $i, 1 \le i \le n$ 个分量比较,即有

$$x_k^{(i)} = \lambda_1^k [c_1 v_1^{(i)} + \varepsilon_k^{(i)}]$$
 (1)
$$x_{k+1}^{(i)} = \lambda_1^{k+1} [c_1 v_1^{(i)} + \varepsilon_{k+1}^{(i)}]$$
 (2)

用(2)式除以(1)式得

$$\frac{x_{k+1}^{(i)}}{x_k^{(i)}} = \lambda_1 \frac{c_1 v_1^{(i)} + \varepsilon_{k+1}^{(i)}}{c_1 v_1^{(i)} + \varepsilon_k^{(i)}}$$

令 $k \longrightarrow +\infty$ 充分大取极限时,有

$$\lim_{k \to +\infty} \frac{x_{k+1}^{(i)}}{x_k^{(i)}} = \lambda_1 \lim_{k \to +\infty} \frac{c_1 v_1^{(i)} + \varepsilon_{k+1}^{(i)}}{c_1 v_1^{(i)} + \varepsilon_k^{(i)}} = \lambda_1$$

亦即迭代向量 x_{k+1} 的第 i 个分量与迭代向量 x_k 的第 i 个分量的比值可以作为矩阵 A 的 主特征值 λ_1 的 近似值.

对于矩阵 A 的模极大的 主特征值 λ_1 是 r 重根的情况可类似证明。我们有如下结论:

【 定理 1. 幂法 (Power Method) 收敛定理 】

矩阵 $A = (a_{ij})_{n \times n} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的所有特征值依照模从大到小的次序排列为

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge \dots \ge |\lambda_n| \ge 0$$

则矩阵 A 的 主特征值 正是矩阵 A 的模极大的特征值 λ_1 . 对应的特征向量称为矩阵 A 的 主特征向量. 则矩阵 A 的所有特征值对应的线性无关特征向量系 v_1, v_2, \dots, v_n , 可以构成向量空间 R^n (或 C^n) 的基向量系.

对于任意非零实向量 $x_0 \neq 0 \in \mathbb{R}^n$ (或非零复向量 $x \neq 0 \in \mathbb{C}^n$),我们有在这个基下的线性组合表示

$$x_0 = c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n, \qquad c_1^2 + c_2^2 + \dots + c_n^2 > 0$$

此时以矩阵 A 为迭代映射构造迭代序列

$$x_k = Ax_{k-1} = A^k x_0 = c_1 \lambda_1^k v_1 + c_2 \lambda_2^k v_2 + \dots + c_n \lambda_n^k v_n$$

当 $k \longrightarrow +\infty$ 充分大时,

$$\lim_{k \longrightarrow +\infty} \frac{x_k}{\lambda_1^k} = c_1 v_1$$

换言之, 迭代向量

$$x_k \approx c_1 \lambda_1^k v_1$$

亦即迭代向量 x_k 可以作为矩阵 A 的 主特征值 λ_1 对应的 主特征向量 v_1 的 近似向量.

而

$$\lambda_1 = \lim_{k \longrightarrow +\infty} \frac{x_{k+1}^{(i)}}{x_k^{(i)}}$$

亦即迭代向量 x_{k+1} 的第 i 个分量与迭代向量 x_k 的第 i 个分量的比值可以作为矩阵 A 的 主特征值 λ_1 的 近似值.

倘若矩阵 A 的模极大的 主特征值 λ_1 是 r 重根,所有特征值 依照模从大到小的次序排列为

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| = \dots = |\lambda_r| > |\lambda_{r+1}| \ge \dots \ge |\lambda_n| \ge 0$$

对应的 r 个线性无关特征向量 v_1, v_2, \dots, v_r 为 主特征向量. 此时以矩阵 A 为迭代映射构造迭代序列

$$x_k = Ax_{k-1} = A^k x_0 = \lambda_1^k \left[\sum_{j=1}^r c_j v_j + \sum_{j=r+1}^n c_j (\frac{\lambda_j}{\lambda_1})^k v_j \right]$$

当 $k \longrightarrow +\infty$ 充分大时,

$$\lim_{k \longrightarrow +\infty} \frac{x_k}{\lambda_1^k} = \sum_{j=1}^r c_j v_j$$

换言之, 迭代向量

$$x_k \approx c_1 \lambda_1^k \sum_{j=1}^r c_j v_j$$

亦即迭代向量 x_k 可以作为矩阵 A 的 主特征值 $\lambda_1 = \cdots = \lambda_r$ 对应的 主特征向量 v_1, v_2, \cdots, v_r 的线性组合的 近似向量.

而与 主特征值 λ1 是单根的情形类似有

$$\lambda_1 = \lim_{k \to +\infty} \frac{x_{k+1}^{(i)}}{x_k^{(i)}}$$

亦即迭代向量 x_{k+1} 的第 i 个分量与迭代向量 x_k 的第 i 个分量的比值可以作为矩阵 A 的 主特征值 λ_1 的 近似值.

【 幂法 (Power Method) 的标准化 】

我们引入 迭代向量 x_k 的第一个具有最大模的坐标分量 $x_k^{(i_0)}$,即此分量的模恰好等于向量 x_k 的 最大模范数 $|x_k^{(i_0)}| = ||x_k||_{\infty}$,而它又是所有具有最大模的坐标分量中首先出现的 (后面可能还有具有最大模的坐标分量,比如向量 $(1,1,\cdots,1)^T$). 换言之,标记 i_0 是 "最小的"或"头一号".

我们并标记此分量为 $x_k^{(i_0)} = \max(x_k)$. 这是个约定俗成的记法. 即 $x_k^{(i_0)} = \max(x_k) := \pm ||x_k||_{\infty}$,

$$|x_k^{(i_0)}| = |\max(x_k)| = ||x_k||_{\infty} = \max(|x_k^{(1)}|, |x_k^{(2)}|, \dots, |x_k^{(n)}|)$$

今 标准化迭代向量

$$y_k := \frac{x_k}{\max(x_k)} = \frac{x_k}{x_k^{(i_0)}}$$

则向量 yk 的 最大模范数 为 1:

$$||y_k||_{\infty} = \frac{||x_k||_{\infty}}{|\max(x_k)|} = \frac{||x_k||_{\infty}}{||x_k||_{\infty}} = 1$$

计算实践中使用幂法,是将标准化迭代程序在每一步里操作,就是"迭代 → 标准化 → 迭代 → 标准化 → 迭代 ······· 步代 ······ ··· ··· 我们获得的是如下标准化幂法迭代程序序列:

【 例 1. 标准化幂法迭代 】

对如下矩阵 A ,给定初始非零向量 $x_0 = (1,1,1)^T$. 试求对应于 特征值 $\lambda_1 = 4$ 的特征向量:

$$A = \left(\begin{array}{ccc} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{array}\right)$$

分别用代数方法和数值方法求解并比较.

解

特征矩阵

$$\lambda I - A = \begin{pmatrix} \lambda - 4 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda - 3 & -1 \\ 0 & -1 & \lambda - 3 \end{pmatrix}$$

特征方程 $|\lambda E - A| = (\lambda - 4)^2(\lambda - 2) = 0$. 故特征根: $\lambda_1 = \lambda_2 = 4$ 为重根, $\lambda_3 = 2$ 为单根.

求特征向量:

对重根 $\lambda_1 = \lambda_2 = 4$, 我们有

$$\lambda = 4, (\lambda E - A)\alpha = 0, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

即 $a_2 - a_3 = 0$. 取 $a_1 = a_2 = a_3 = 1$, 得一个特征向量 $\alpha_1 = (1, 1, 1)^T$.

用幂法迭代求解.

给定初始非零向量 $x_0 = (1,1,1)^T$ (这里初始向量碰巧选择得好,就是特征向量!多数情况要尝试),标准化幂法迭代程序 序列为

$$x_{1} = Ax_{0} = Ay_{0}, y_{1} = \frac{x_{1}}{\max(x_{1})} = \frac{Ax_{0}}{\max(Ax_{0})}$$

$$x_{2} = \frac{A^{2}x_{0}}{\max(Ax_{0})}, y_{2} = \frac{x_{2}}{\max(x_{2})} = \frac{A^{2}x_{0}}{\max(A^{2}x_{0})}$$

$$x_{k} = \frac{A^{k}x_{0}}{\max(A^{k-1}x_{0})}, y_{k} = \frac{x_{k}}{\max(x_{k})} = \frac{A^{k}x_{0}}{\max(A^{k}x_{0})}$$

迭代一步就是

$$x_{1} = Ax_{0} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix}$$
$$y_{1} = \frac{x_{1}}{\max(x_{1})} = \frac{(4, 4, 4)^{T}}{\max(4, 4, 4)^{T}} = \frac{(4, 4, 4)^{T}}{4} = (1, 1, 1)^{T}$$

倘若任意选择初始非零向量 $x_0 = (2,1,0)^T$, 标准化幂法迭代程序 序列迭代一步就是

$$x_{1} = Ax_{0} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$
$$y_{1} = \frac{x_{1}}{\max(x_{1})} = \frac{(8, 3, 1)^{T}}{\max(8, 3, 1)^{T}} = \frac{(8, 3, 1)^{T}}{8} = (1, \frac{3}{8}, \frac{1}{8})^{T}$$

标准化幂法迭代程序序列再迭代一步就是

$$x_{2} = Ay_{1} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{10} \\ \frac{10}{8} \\ \frac{6}{8} \end{pmatrix}$$

$$y_{2} = \frac{x_{2}}{\max(x_{2})} = \frac{(4, \frac{10}{8}, \frac{6}{8})^{T}}{\max(4, \frac{10}{8}, \frac{6}{8})^{T}} = \frac{(4, \frac{10}{8}, \frac{6}{8})^{T}}{4} = (1, \frac{10}{32}, \frac{6}{32})^{T}$$

而 改进迭代向量 x_2 的第 1 个具有最大模的分量可以作为矩阵 A 的 主特征值 λ_1 的 近似值:

$$\lambda_1 \approx \max(x_2) = 4$$

事实上它已经达到了真值!

7.1.2 **幂法的加速** (Acceleration of Power Method)

我们看到,幂法的原始迭代为

$$x_k = Ax_{k-1} = A^k x_0 = \lambda_1^k [c_1 v_1 + \varepsilon_k]$$

其中
$$\varepsilon_k = \sum_{j=2}^n c_j (\frac{\lambda_j}{\lambda_1})^k v_j$$
. 由于 $|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge \dots \ge |\lambda_n|$, 故而 $|\frac{\lambda_j}{\lambda_1}| < 1$.

于是余项向量

$$\varepsilon_k = \sum_{j=2}^n c_j (\frac{\lambda_j}{\lambda_1})^k v_j \longrightarrow 0, \quad k \longrightarrow +\infty$$

显然, 余项向量趋向于 0 的速度越快, 幂法的收敛速度越快. 从而幂法 (Power Method) 的 收敛速度 取决于比值 (次大特征值和最大特征值模的比值)

$$r = \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right| < 1$$

我们希望比值越小越好. 当 $r \ll 1$ 时,收敛速度比较快. 但若当 $r \approx 1$ 时,收敛速度可能很慢. 此时我们需要对迭代进行加速.

【加速方法 1. 原点位移加速 (Shift Acceleration of Power Method) 】

矩阵 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 的所有特征值依照模从大到小的次序排列为

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge \dots \ge |\lambda_n| \ge 0$$

矩阵 A 的 主特征值 是模极大的特征值 λ_1 . 对应的特征向量 v_1 为 主特征向量.

引入参数 p, 辅助矩阵 B = A - pI 的所有特征值为

$$\lambda_1 - p, \lambda_2 - p, \cdots, \lambda_n - p$$

适当选择参数 p, 使得辅助矩阵 B = A - pI 的 主特征值 为 $\lambda_1 - p$, 且

$$\frac{|\lambda_2 - p|}{|\lambda_1 - p|}| < r = \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right| < 1$$

【 命题 1 】

矩阵 $A = (a_{ij})_{n \times n}$ 的所有特征值全是实数(比如 Hermite 矩阵或实对称矩阵特征值就全是实数),依照从大到小的次序排列为

$$\lambda_1 > \lambda_2 \ge \dots \ge \lambda_{n-1} > \lambda_n$$

当选择参数 $\lambda_n < p^* < \lambda_2$ 为中点

$$p^* = \frac{\lambda_2 + \lambda_n}{2}$$

时辅助矩阵 B = A - pI 的 收敛速度 的比值达到最小值.

【证明略】

【释例. 原点位移加速幂法】

某四阶矩阵 A 具有特征根:

$$\lambda_1 = 14, \lambda_2 = 13, \lambda_1 = 12, \lambda_2 = 11$$

试求 收敛速度比 $r = |\frac{\lambda_2}{\lambda_1}|$.

适当选择参数 p, 构造原点位移辅助矩阵 B = A - pI 再求 收敛速度比

$$r = \max(\frac{|\lambda_2 - p|}{|\lambda_1 - p|}, \frac{|\lambda_n - p|}{|\lambda_1 - p|})$$

并比较位移前后的收敛速度.

解

四阶矩阵 A 具有特征根:

$$\lambda_1 = 14, \lambda_2 = 13, \lambda_3 = 12, \lambda_4 = 11$$

于是收敛速度比

$$r = \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right| = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \frac{13}{14} \approx 0.92857$$

适当选择参数

$$p = \frac{\lambda_2 + \lambda_n}{2} = \frac{13 + 11}{2} = 12$$

构造原点位移辅助矩阵 B = A - pI = A - 12I, 则 收敛速度比

$$r = \max(\frac{|\lambda_2 - p|}{|\lambda_1 - p|}, \frac{|\lambda_n - p|}{|\lambda_1 - p|}) = \frac{|\lambda_2 - p|}{|\lambda_1 - p|} = \frac{13 - 12}{14 - 12} \approx 0.5$$

位移后的收敛速度大大加快.

【 例 1. 原点位移加速幂法 】

令 初始迭代向量 $x_0 = y_0 = (1,1,1)^T$. 适当选择参数 p = -0.5, 构造原点位移辅助矩阵 B = A - pI, 求矩阵

$$A = \left(\begin{array}{ccc} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \end{array}\right)$$

的 主特征值 和 主特征向量.

解 用原点位移加速幂法迭代求解.

取参数 p = -0.5, 构造 原点位移矩阵

$$B = (A - pI) = \begin{pmatrix} 1 + 0.5 & 2 & 3\\ 2 & 3 + 0.5 & 4\\ 3 & 4 & 5 + 0.5 \end{pmatrix}$$

$$= \left(\begin{array}{ccc} 1.5 & 2 & 3\\ 2 & 3.5 & 4\\ 3 & 4 & 5.5 \end{array}\right)$$

以原点位移矩阵 B = (A - pI) 为迭代映射构造幂法迭代序列

$$\begin{cases} x_0 &= y_0 = (1, 1, 1)^T \\ x_k &= By_{k-1} = (A - pI)y_{k-1} \\ \mu_k &= \max(x_k) \\ y_k &= \frac{x_k}{\mu_k} = \frac{x_k}{\max(x_k)} \end{cases}$$

迭代一步就是

$$\begin{pmatrix} x_1^{(1)} \\ x_1^{(2)} \\ x_1^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 & 2 & 3 \\ 2 & 3.5 & 4 \\ 3 & 4 & 5.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6.5 \\ 9.5 \\ 12.5 \end{pmatrix}$$

标准化得

$$y_1 = \frac{x_1}{\max(x_1)} = \frac{(6.5, 9.5, 12.5)^T}{12.5} = (0.52, 0.76, 1)^T$$

再迭代一步就是

$$\begin{pmatrix} x_2^{(1)} \\ x_2^{(2)} \\ x_2^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 & 2 & 3 \\ 2 & 3.5 & 4 \\ 3 & 4 & 5.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.52 \\ 0.76 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.3 \\ 7.7 \\ 10.1 \end{pmatrix}$$

标准化得

$$y_2 = \frac{x_2}{\max(x_2)} = \frac{(5.3, 7.7, 10.1)^T}{10.1} = (0.52475, 0.76237624, 1)^T$$

迭代向量 $x_2 = (5.3, 7.7, 10.1)^T$ 的最大模分量接近于 位移矩阵 B = (A - pI) 的精确的 主特征值

$$\lambda_1 \approx \max(x_2) = 10.1$$

从而由于对应的 原始矩阵 A 的 主特征值 $\lambda_1(A) = \lambda_1 - p$,故 $\lambda_1(A)$ 的近似值为

$$\lambda_1(A) \approx p + \max(x_2) = -0.5 + 10.1 = 9.6$$

并且对应的 主特征向量 为

$$y_2 = (0.52475, 0.76237624, 1)^T$$