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

7.3 矩阵特征值的 QR 算法

7.3.1 QR 正交三角分解算法

QR(正交三角) 分解算法是由 西方学者 J.G.Francis 和苏联女学者 V.N.Kublanovskaya(忽必烈诺夫斯卡雅) 于 1961 年独立发现的,取代了 Rutishauser 于 1958 年基于矩阵的三角分解建立起来的 LR 算法,更加稳定.

1955 年人们还在为计算矩阵特征值大伤脑筋, 1965 年基于 QR 算法的程序已经相当成熟. QR 算法对于解决矩阵特征值计算问题具有里程碑意义,至今仍然是最有效和最实用的方法之一.

【 定义 1.QR 正交三角分解基本算法 (Basic QR Method) 】

注意到正交矩阵满足 $Q^TQ = I$,由于矩阵 A 具有正交三角 QR 分解

$$A = QR, \Leftrightarrow R = Q^T A$$

由此可以构造与矩阵 A正交相似 的新的矩阵 B 为

$$B = RQ = Q^T A Q \sim A$$

众所周知,一对相似矩阵 B 与 A 具有完全相同的 全部特征值 和 全部特征向量. 因此如果经过 正交相似变换 获得的新的矩阵 B 能够比较容易地求得 特征值 和 特征向量,则初始矩阵 A 的 特征值 和 特征向量 求解问题就可以简化.

对于新矩阵可以再度进行正交三角 QR 分解得到

$$B = RQ = Q^T A Q = Q'R'$$

同时我们获得一种类似"可交换"性质的等式

$$RQ = Q'R'$$

然而右方的正交三角矩阵 Q', R' 是全新的.

照葫芦画瓢,这样我们将得到一个以矩阵 $A_1 = A$ 为初始矩阵的序列:

$$\begin{cases}
A_1 & = A & = Q_1R_1 \\
A_2 & = R_1Q_1 = Q_1^T A_1 Q_1 & = Q_2R_2 \\
A_3 & = R_2Q_2 = Q_2^T A_2 Q_2 & = Q_3R_3 \\
A_4 & = R_3Q_3 = Q_3^T A_3 Q_3 & = Q_4R_4 \\
\dots & \dots & \dots & \dots \\
A_k & = R_{k-1}Q_{k-1} = Q_{k-1}^T A_{k-1}Q_{k-1} & = Q_kR_k \\
A_{k+1} & = R_kQ_k = Q_k^T A_k Q_k & = Q_{k+1}R_{k+1} \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots
\end{cases}$$

于是向初始矩阵迭代有

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k = Q_k^T Q_{k-1}^T A_{k-1} Q_{k-1} Q_k$$

$$= \dots = Q_k^T Q_{k-1}^T \dots Q_2^T Q_1^T A_1 Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1} Q_k$$

$$= (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1} Q_k)^T A_1 Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1} Q_k$$

$$= \tilde{Q}_k^T A_1 \tilde{Q}_k$$

我们标记连乘积形式的正交矩阵 \tilde{Q}_k 为正交矩阵序列顺序相乘,而上三角矩阵 \tilde{R}_k 为上三角矩阵序列倒序相乘.即

$$\tilde{Q}_k := Q_1 Q_2 \cdots Q_{k-1} Q_k, \qquad \tilde{R}_k := R_k R_{k-1} \cdots R_2 R_1$$

则显然有性质:

- I. 矩阵序列 A_k 中的所有矩阵彼此 正交相似: $A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k$.
- II. 矩阵序列 A_k 中的所有矩阵与初始矩阵 $A_1 = A$ 正交相似: $A_{k+1} = \tilde{Q}_k^T A_1 \tilde{Q}_k$.

此外,还有一条非常重要的"幂表达"的性质: $A^k = \tilde{Q}_k \tilde{R}_k$. 事实上,归纳假设 $A^{k-1} = \tilde{Q}_{k-1} \tilde{R}_{k-1}$. 则

$$\tilde{Q}_{k}\tilde{R}_{k} = Q_{1}Q_{2}\cdots Q_{k-1}(Q_{k}R_{k})R_{k-1}\cdots R_{2}R_{1}$$

$$= Q_{1}Q_{2}\cdots Q_{k-1}A_{k}R_{k-1}\cdots R_{2}R_{1}$$

$$= \tilde{Q}_{k-1}A_{k}\tilde{R}_{k-1}$$

$$= \tilde{Q}_{k-1}\tilde{Q}_{k-1}^{T}A_{1}\tilde{Q}_{k-1}\tilde{R}_{k-1}$$

$$= A_{1}\tilde{Q}_{k-1}\tilde{R}_{k-1} = AA^{k-1} = A^{k}$$

再由矩阵 A_k 的正交三角 QR 分解程序,

$$A_k = Q_k R_k, \qquad R_k = Q_k^T A_k$$

标记正交矩阵 Q_k^T 为连乘积形式的 Givens 旋转正交矩阵序列或 Householder 初等反射正交矩阵序列倒序相乘. 即

$$Q_k^T := P_{n-1} \cdots P_2 P_1$$

则有

$$R_k = Q_k^T A_k = P_{n-1} \cdots P_2 P_1 A_k$$

并且

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k$$

$$= P_{n-1} \cdots P_2 P_1 A_k (P_{n-1} \cdots P_2 P_1)^T$$

$$= P_{n-1} \cdots P_2 P_1 A_k P_1^T P_2^T \cdots P_{n-1}^T$$

从而矩阵 A_{k+1} 可以通过对 A_k 作两个连续的左右正交变换获得:

- I. 前锋矩阵 A_k 左正交变换: $P_{n-1}\cdots P_2P_1A_k=R_k$.
- II. 上三角矩阵 R_k 右正交变换: $A_{k+1} = R_k P_1^T P_2^T \cdots P_{n-1}^T$.

上述算法称为 正交三角分解基本 QR 算法 (QR Method).

【 定理 1. 基本 QR 算法的基本收敛 (Essential Convergence of QR Method) 】

标记
$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$A_k = \begin{pmatrix} a_{11}^{(k)} & a_{12}^{(k)} & \cdots & a_{1n}^{(k)} \\ a_{21}^{(k)} & a_{22}^{(k)} & \cdots & a_{2n}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^{(k)} & a_{n2}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}$$

即有:

- I. 矩阵序列 A_k 主对角元 收敛于特征值: $\lim_{k\to +\infty} a_{ii}^{(k)} = \lambda_i.$
- II. 矩阵序列 A_k 下对角元 收敛于零: $\lim_{k \to +\infty} a_{ij}^{(k)} = 0, \qquad i > j.$

而当 i < j 时,极限 $\lim_{k \to +\infty} a_{ij}^{(k)}$ 未必存在. 这就是所谓"基本 收敛". 但当矩阵 $A = (a_{ij}) = (a_{ji})$ 是 对称矩阵 时, 显然有: 矩阵序列 A_k 上对角元 收敛于零: $\lim_{k \to +\infty} a_{ij}^{(k)} = 0, \qquad i < j.$

$$\lim_{k \to +\infty} a_{ij}^{(k)} = 0, \qquad i < j.$$

亦即矩阵 $A = (a_{ij}) = (a_{ji})$ 是 对称矩阵 时, 矩阵 A_k 收敛于 对角矩阵 D:

$$\lim_{k \to +\infty} A_k = D = Diag[\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n]$$

【 **例** 1. Givens 旋转变换基本 QR 算法 】

对于如下对称矩阵

$$A = \left(\begin{array}{cc} 8 & 2\\ 2 & 5 \end{array}\right)$$

存在特征值: $\lambda_1 = 9 > \lambda_2 = 4$. 满足基本 QR 算法的基本收敛条件. 试用系列 Givens 旋转变换矩阵 $P = P(i, j, \theta)$ 的乘积形式的正交矩阵 $Q_k^T = P_{n-1} \cdots P_2 P_1$ 构造基本 QR 算法矩阵序列 A_k . 并计算所用正交矩阵 Q_k^T 和 上三角矩阵 R_k .

解

由 Givens 焱转约化定理 , 对于非零向量 $x = (x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_n)^T, x_i^2 + x_j^2 \neq 0$, 存在平面旋转阵 $P = P(i, j, \theta)$ 使分量 x_i 化为 0. 即

对于非零向量 $x = (8,2)^T$, 存在 2 阶 Givens 旋转变换阵 $P(1,2,\theta_1)$ 使分量 $x_2 = 2$ 化为 0 且 $P(1,2,\theta_1)x = \alpha_1 = \sigma e_1$. 下面来逐个计算各个参数、向量和矩阵:

$$x_1' = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = \sqrt{8^2 + 2^2} = \sqrt{68}.$$

取三角函数为

$$c = \cos \theta = \frac{x_i}{x_i'} = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} = \frac{8}{\sqrt{68}}$$
$$s = \sin \theta = \frac{x_j}{x_i'} = \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} = \frac{2}{\sqrt{68}}$$

于是取旋转角度为 $\theta_1 = \arctan \frac{x_j}{x_i} = \arctan \frac{1}{4}$ 时,我们有在此平面旋转变换之下的向量为

$$P(1, 2, \theta_1)x = P(1, 2, \theta_1)(8, 2)^T = (\sqrt{68}, 0)^T = \sigma e_1,$$

 $\sigma = \sqrt{68} > 0.$

而相应的正交矩阵 Q^T 即 2 阶 Givens 旋转变换矩阵取为

$$Q_1^T = P(1, 2, \theta_1) = \begin{pmatrix} \frac{8}{\sqrt{68}} & \frac{2}{\sqrt{68}} \\ -\frac{2}{\sqrt{68}} & \frac{8}{\sqrt{68}} \end{pmatrix}$$

亦即正交矩阵

$$Q_1 = P(1, 2, \theta_1)^T = \begin{pmatrix} \frac{8}{\sqrt{68}} & -\frac{2}{\sqrt{68}} \\ \frac{2}{\sqrt{68}} & \frac{8}{\sqrt{68}} \end{pmatrix}$$

在此正交变换下对称矩阵 A 约化成为 上三角矩阵 R_1 .

即

$$R_{1} = Q_{1}^{T} A = \begin{pmatrix} \frac{8}{\sqrt{68}} & \frac{2}{\sqrt{68}} \\ -\frac{2}{\sqrt{68}} & \frac{8}{\sqrt{68}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 8 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{68}} \begin{pmatrix} 68 & 26 \\ 0 & 36 \end{pmatrix}$$

从而我们有基本 QR 算法矩阵序列

$$A_{2} = R_{1}Q_{1} = \frac{1}{\sqrt{68}} \begin{pmatrix} 68 & 26 \\ 0 & 36 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{8}{\sqrt{68}} & -\frac{2}{\sqrt{68}} \\ \frac{2}{\sqrt{68}} & \frac{8}{\sqrt{68}} \end{pmatrix} = \frac{1}{68} \begin{pmatrix} 596 & 72 \\ 72 & 288 \end{pmatrix}$$

$$\approx \begin{pmatrix} 8.7647 & 1.0588 \\ 1.0588 & 4.2353 \end{pmatrix}.$$

可见,矩阵 A_2 依然是 对称矩阵,而其 主对角元 更接近于真实特征值即 $\lambda_1 = 9, \lambda_2 = 4$. 上下对角元 则趋向于零: $\lim_{k \to +\infty} a_{ij}^{(k)} = 0, \quad i < j, i > j$. 总之,矩阵 A_2 更接近于 对角矩阵 $D = Diag[\lambda_1, \lambda_2]$. 基本 QR 算法仅仅迭代一步便初见成效.

7.3.2 QR **算法的原点位移加速**

前述正交三角 QR 算法 (QR Method) 是计算矩阵 A 的 基本 算法,收敛速度可能很慢.类似于幂法和反幂法的加速思想,我们也希望对基本 QR 算法进行加速.

【原点位移 QR 算法的引入】

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

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

由基本 QR 算法结论,矩阵序列 A_k 的 主对角元 序列收敛于特征值: $\lim_{k\to +\infty} a_{ii}^{(k)} = \lambda_i$.

特别地,对于最小模的特征值有

$$\lim_{k \to +\infty} a_{nn}^{(k)} = \lambda_n$$

而"收敛速度"依赖于比值

$$r_n = \frac{|\lambda_n|}{|\lambda_{n-1}|}$$

引入参数 p, 则位移矩阵 B = (A - pI) 的所有特征值为

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

现在假定 参数 p 是矩阵 A 的 "最小模" 特征值 λ_n 的 近似值,即满足 分离条件:

$$|\lambda_n - p| \ll |\lambda_i - p|, \qquad i \neq n$$

此时对于位移矩阵 B = (A - pI) 使用 QR 算法,则矩阵序列 $A_k - pI$ 的处在 (n, n-1) 位置的元素将以更快的速度 $r_n = \frac{|\lambda_n - p|}{|\lambda_{n-1} - p|}$ 线性收敛于零.

每次执行这样的程序:

- I. 选定好每步的位移参数 p_k ,构造位移矩阵 $A_k p_k I$.
- II. 对于位移矩阵 $A_k p_k I$ 作 正交三角 QR 分解:

$$A_k - p_k I = Q_k R_k.$$

III. 构造矩阵序列的后继矩阵 $A_{k+1} = R_k Q_k + p_k I$.

照葫芦画瓢,这样我们将得到一个以矩阵 $A_1 = A$ 为初始矩阵的序列:

简写为

$$\begin{cases} A_k - p_k I = Q_k R_k \\ A_{k+1} = R_k Q_k + p_k I \end{cases}$$

于是有

$$A_{k+1} = R_k Q_k + p_k I = Q_k^T A_k Q_k = Q_k^T Q_{k-1}^T A_{k-1} Q_{k-1} Q_k$$

$$= \dots = Q_k^T Q_{k-1}^T \dots Q_2^T Q_1^T A_1 Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1} Q_k$$

$$= (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1} Q_k)^T A_1 Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1} Q_k$$

$$= \tilde{Q}_k^T A_1 \tilde{Q}_k$$

我们标记连乘积形式的正交矩阵 \tilde{Q}_k 为正交矩阵序列顺序相乘,而上三角矩阵 \tilde{R}_k 为上三角矩阵序列倒序相乘.即

$$\tilde{Q}_k := Q_1 Q_2 \cdots Q_{k-1} Q_k, \qquad \tilde{R}_k := R_k R_{k-1} \cdots R_2 R_1$$

则显然有:

$$\prod_{k=1}^{n} (A - p_k I) = \tilde{Q}_k \tilde{R}_k$$

【例 1. Givens 旋转变换 Rayleigh 商原点位移 QR 算法】 对于如下对称矩阵

$$A = \left(\begin{array}{cc} 8 & 2\\ 2 & 5 \end{array}\right)$$

存在特征值: $\lambda_1 = 9 > \lambda_2 = 4$. 满足基本 QR 算法的基本收敛条件. 适当选择位移参数 p_k ,构造原点位移 QR 算法矩阵序列 A_k . 并计算所用正交矩阵 Q_k^T 和 上三角矩阵 R_k .

解

我们执行如下"三步走"方案.

- I. 选择 位移参数: $p_k = a_{nn}^{(k)}$. 构造位移矩阵 $A_k p_k I$.
- II. 对于位移矩阵 $A_k p_k I$ 作 正交三角 QR 分解:

 $A_k - p_k I = Q_k R_k.$

III. 构造矩阵序列的后继矩阵 $A_{k+1} = R_k Q_k + p_k I$.

I. 选择 位移参数: $p_1 = a_{nn}^{(1)} = 5$. 构造位移矩阵 $A_1 - p_1 I$.

$$A_1 - p_1 I = \begin{pmatrix} 8 - 5 & 2 \\ 2 & 5 - 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

II. 对于位移矩阵 $A_k - p_k I$ 作 正交三角 QR 分解: $A_k - p_k I = Q_k R_k$.

由 Givens 焱转约化定理 ,对于非零向量 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_i,\cdots,x_j,\cdots,x_n)^T, x_i^2+x_j^2\neq 0$,存在平面旋转阵 $P=P(i,j,\theta)$ 使分量 x_j 化为 0. 即

$$\begin{cases}
Px &= P(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_n)^T \\
&= P(x_1, x_2, \dots, x_i', \dots, 0, \dots, x_n)^T \\
x_i' &= \sqrt{x_i^2 + x_j^2} \\
\theta &= \arctan \frac{x_j}{x_i}
\end{cases}$$

对于非零向量 $x = (3,2)^T$,存在 2 阶 Givens 旋转变换阵 $P(1,2,\theta_1)$ 使分量 $x_2 = 2$ 化为 0 且 $P(1,2,\theta_1)x = \alpha_1 = \sigma e_1$. 下面来逐个计算各个参数、向量和矩阵: $x_1' = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = \sqrt{3^2 + 2^2} = \sqrt{13}$.

取三角函数为

$$c = \cos \theta = \frac{x_i}{x_i'} = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} = \frac{3}{\sqrt{13}}$$

$$s = \sin \theta = \frac{x_j}{x_i'} = \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} = \frac{2}{\sqrt{13}}$$

于是取旋转角度为 $\theta_1 = \arctan \frac{x_j}{x_i} = \arctan \frac{2}{3}$ 时,我们有在此平面旋转变换之下的向量为

$$P(1, 2, \theta_1)x = P(1, 2, \theta_1)(3, 2)^T = (\sqrt{13}, 0)^T = \sigma e_1,$$

 $\sigma = \sqrt{13} > 0.$

而相应的正交矩阵 Q^T 即 2 阶 Givens 旋转变换矩阵取为

$$Q_1^T = P(1, 2, \theta_1) = \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{13}} & \frac{2}{\sqrt{13}} \\ -\frac{2}{\sqrt{13}} & \frac{3}{\sqrt{13}} \end{pmatrix}$$

亦即正交矩阵

$$Q_1 = P(1, 2, \theta_1)^T = \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{13}} & -\frac{2}{\sqrt{13}} \\ \frac{2}{\sqrt{13}} & \frac{3}{\sqrt{13}} \end{pmatrix}$$

在此正交变换下位移矩阵 $A_1 - p_1 I$ 约化成为 上三角矩阵 R_1 . 即

$$R_{1} = Q_{1}^{T}(A_{1} - p_{1}I) = \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{13}} & \frac{2}{\sqrt{13}} \\ -\frac{2}{\sqrt{13}} & \frac{3}{\sqrt{13}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{13}} \begin{pmatrix} 13 & 6 \\ 0 & -4 \end{pmatrix}$$

III. 构造矩阵序列的后继矩阵 $A_{k+1} = R_k Q_k + p_k I$.

$$A_{2} = R_{1}Q_{1} + p_{1}I =$$

$$\frac{1}{\sqrt{13}} \begin{pmatrix} 13 & 6 \\ 0 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{13}} & -\frac{2}{\sqrt{13}} \\ \frac{2}{\sqrt{12}} & \frac{3}{\sqrt{12}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 5 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{13} \begin{pmatrix} 51 & -8 \\ -8 & -12 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 5 \end{pmatrix} = \frac{1}{13} \begin{pmatrix} 51 & -8 \\ -8 & -12 \end{pmatrix} + \frac{1}{13} \begin{pmatrix} 65 & 0 \\ 0 & 65 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{13} \begin{pmatrix} 116 & -8 \\ -8 & 53 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 8.923076923 & -0.61538461538 \\ -0.61538461538 & 4.076923076923 \end{pmatrix}.$$

可见,矩阵 A_2 依然是 对称矩阵,而其 主对角元 更接近于真实特征值即 $\lambda_1 = 9, \lambda_2 = 4$. 上下对角元 则趋向于零: $\lim_{k \to +\infty} a_{ij}^{(k)} = 0, \quad i < j, i > j$. 总之,矩阵 A_2 更接近于 对角矩阵 $D = Diag[\lambda_1, \lambda_2]$. 原点位移 QR 算法仅仅迭代一步便初见成效.

下一步选取 位移参数: $p_2 = a_{nn}^{(2)} = 4.076923076923$. 构造位移矩阵 $A_2 - p_2 I$. 继续迭代计算,我们有原点位移 QR 算法矩阵序列

$$A_3 \approx \begin{pmatrix} 8.999981 & -0.009766 \\ -0.009766 & 4.000019 \end{pmatrix}.$$

$$A_4 \approx \begin{pmatrix} 9.0000000 & -3.7 \times 10^{-7} \\ -3.7 \times 10^{-7} & 4.000000 \end{pmatrix}.$$

仅仅迭代几步便几乎已经完美地逼近真实特征值即 $\lambda_1 = 9, \lambda_2 = 4$!

【注记. 原点位移 QR 算法与基本 QR 算法的收敛速度比较】

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

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

基本 QR 算法的"收敛速度"依赖于比值

$$r_n = \frac{|\lambda_n|}{|\lambda_{n-1}|} = \frac{4}{9}$$

引入参数 p=5, 则位移矩阵 B=(A-pI) 的所有特征值为

$$\lambda_1 - p = 9 - 5 = 4, \lambda_2 - p = 4 - 5 = -1$$

原点位移 QR 算法将以更快的速度

$$r_n = \frac{|\lambda_n - p|}{|\lambda_{n-1} - p|} = \frac{1}{4} < \frac{4}{9}$$

收敛.