# 特征值问题的数值算法简介

Abstract: 简单介绍
- Power iteration 幂法
- QR iteration QR 叠代
- QR iteration with shifts
- Francis's algorithm

更多细节请参考数值代数的相关参考书.
了解各个算法的特点,根据不同的应用场景选择适合的算法.

## 1. Power iteration

前提条件: A 的 n 个特征值 $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ 满足排序:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|,$$

且存在 n 个线性无关的特征向量 $\{\vec{x}_i\}_{i=1}^n$.

$\forall$ 非零向量 $\vec{x} \in \mathbb{C}^n$, 存在关于特征向量 $\{\vec{x}_i\}_{i=1}^n$ 的线性表示: $\vec{x} = \sum_{i=1}^n k_i \vec{x}_i$.

计算
$$A^t \vec{x} = A^t \left( \sum_{i=1}^n k_i \vec{x}_i \right) = \sum_{i=1}^n k_i (A^t \vec{x}_i)$$
$$= \sum_{i=1}^n k_i \lambda_i^t \vec{x}_i$$
$$= \lambda_1^t k_1 \vec{x}_1 + \lambda_1^t \sum_{i=2}^n k_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^t \vec{x}_i.$$

假设 $k_1 \neq 0$, 令 $t \to \infty$, 则有 $\left|\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^t\right| \longrightarrow 0$, 从而有

$A^t\vec{x} \longrightarrow \lambda_1^t k_1\vec{x}_1$.

幂法是反复使用A，使得 $(\lambda_1, \vec{x}_1)$ 保留下来，其它部分趋于0.

The algorithm of Power iteration:

① 初始化：随机取一个非零向量 $\vec{x}_0$.

(随机法一般可保证 $k_1 \neq 0$，或多取几次不同初值)

② 迭代：

FOR $t = 1, 2, 3, \cdots$

$\vec{x}_t = A\vec{x}_{t-1}$ $(A^t\vec{x}_0)$

满足一定收敛的条件，则终止循环.

END

Ex1. 考虑矩阵 $A = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$

计算特征多项式 $P_A(\lambda) = |\lambda I_2 - A| = \begin{vmatrix} \lambda-3 & -1 \\ -1 & \lambda-3 \end{vmatrix}$

$= (\lambda-3)^2 - 1$.

令 $P_A(\lambda) = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 4, \quad \lambda_2 = 2$.

计算 $\lambda_1$ 对应的特征向量，可得到

$$N(\lambda_1 I_2 - A) = \mathrm{span}\left(\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}\right).$$

选择初始向量 $\vec{x}_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$，计算 $\vec{x}_t$ for $t \geq 1$.

| $t$ | $\vec{x}_t$ | $\frac{\lVert \vec{x}_t \rVert}{\lVert \vec{x}_{t-1} \rVert}$ |
|---|---|---|
| 0 | $[0\ \ 1]^T$ | — |
| 1 | $[1\ \ 3]^T$ | 3.000 |
| 2 | $[6\ \ 10]^T$ | 3.333 |
| 3 | $[28\ \ 36]^T$ | 3.600 |
| ⋮ | ⋮ | |
| 8 | $[32640\ \ 32896]^T$ | 3.984 |
| 9 | $[130816\ \ 131328]^T$ | 3.992 |
| ↓ | ↓ | ↓ |
| $\infty$ | $k\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$ for some $k$ | $\lvert\lambda_1\rvert=\lambda_1=4.$ |

$\rightarrow \lvert\lambda_1\rvert=\lambda_1=4.$

3

Remark: 收敛速度和 $\left\{\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right|\right\}_{i=2}^{n}$ 有关.

改进: 对 $\vec{x}_{t-1}$ 作单位化, 再计算 $\vec{x}_t = A\vec{x}_{t-1}$, 以免数据溢出.

## $\boxed{2.}$ QR iteration

仅介绍算法:

① 初始化: $A_0 = A$.

② 叠代: FOR $t = 0, 1, 2, \cdots$

计算 $A_t$ 的 QR 分解: $A_t = Q_t R_t$

计算新矩阵 $A_{t+1} = R_t Q_t = Q_t^T A_t Q_t$.

满足一定收敛条件, 停止循环.

END

只需要 $Q_t$

Remark: 当 $t\to\infty$ 时，$A_{t+1}$ 的对角元素收敛于 $A$ 的 $n$ 个特征值.

Drawback: 计算量大.

## 3. QR iteration with shifts.

引入一个平移，增大排序在前两位的特征值之间的差距.

$$\tilde{A} = A - \sigma I_n, \quad \text{其中 } \sigma \in \mathbb{C} \text{ or } \mathbb{R}.$$

设 $A$ 的特征值为 $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$，且有

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|.$$

则 $\tilde{A}$ 的特征值 $\{\mu_i = \lambda_i - \sigma\}_{i=1}^n$ 在适当的平移 $\sigma$ 下仍保持排序:

$$|\mu_1| > |\mu_2| \geq |\mu_3| \geq \cdots \geq |\mu_n|,$$

且 $\left|\frac{\mu_2}{\mu_1}\right| < \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$.

所以在计算 $\tilde{A}$ 的特征值时，有更快的收敛速度

最后从 $\mu_i$ 可得到 $\lambda_i$.

例如 $A$ 有 $\begin{cases}\lambda_1 = 1.5 \\ \lambda_2 = 0.5\end{cases}$. 取 $\sigma = 0.25$，则可知

$\tilde{A}$ 的特征值有 $\begin{cases}\mu_1 = 1.25 \\ \mu_2 = 0.25\end{cases}$. 显然有

$$\left|\frac{\mu_2}{\mu_1}\right| = \frac{1}{5} < \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right| = \frac{1}{3}.$$

更一般的，我们可以在每一步迭代中，引入不同的平移 $\sigma_t$: $\tilde{A}_t = A_t - \sigma_t I_n$,

或引入两次平移: $\tilde{A}_t = (A_t - \sigma_t I_n)(A_t - \sigma_t' I_n)$.

QR iteration or QR iteration with shifts 的计算量主要是 QR 分解，所以一般需要 $O(n^3)$.

## 4 Francis's algorithm.

Francis's algorithm 把 QR iteration with shifts 的计算量降到了 $O(n^2)$.

① 预处理:

有较高计算效率的算法把给定矩阵 A 通过相似变换化为一个 Hessenberg 矩阵:

$$H_0 = X^{-1} A X = \begin{bmatrix} h_{11} & \cdots & & * \\ h_{21} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & h_{n,n-1} & h_{nn} \end{bmatrix}$$

② 对 $H_0$ 使用 QR iteration with shifts.

③ 事实上，我们只需要 QR 分解中的矩阵 $Q_t$，Francis's algorithm 采取一种隐式方法计算 $Q_t$，只需要 $O(n^2)$ 的计算量.