第五讲 对称矩阵的特征值问题

1. Jacobi 迭代
2. Raylaogh 商迭代
3. 对称 QR 迭代
4. 分而治之法
5. 对分法和逆迭代
6. 奇异值分解
7. 扰动分析

关于对称特征值问题的常用算法有（直接法）：

- Jacobi 迭代: 最古老, 收敛速度较慢, 但精度较高, 且很适合并行计算。
- Rayleigh 商迭代: 一般具有三次收敛性, 但需要解方程组。
- 对称 QR 迭代: 对称矩阵的 QR 方法. 对于对称三对角矩阵, 若只计算特征值, 则速度最快 (运算量为 $\mathcal{O}(n^2)$)。如果还需要计算特征向量，则运算量约为 $6n^3$。
- 分而治之法：同时计算特征值和特征向量的一种快速算法。基本思想时将大矩阵分解形成小矩阵，然后利用递归思想求特征值。在最坏的情形下，运算量为 $\mathcal{O}(n^3)$。在实际应用中，平均为 $\mathcal{O}(n^{2.3})$。如果使用快速多极子算法 (FMM) 后，理论上的运算量可降低到 $\mathcal{O}(n\log^p n)$，其中 p 时一个较小的整数，这使得分而治之算法陈给目前计算对称三对角矩阵的 特征值和特征向量 的首选方法。
- 对分法和反迭代：对分法主要用于求解对称三交矩阵在某个区间中的特征值，运算量约为 $\mathcal{O}(kn)$。其中 k 为所需计算的特征值的个数。反迭代用于计算特征向量，在最佳情况下，即特征值“适当分离”时，运算量约为 $\mathcal{O}(kn)$，但在最差情况下，即特征值成串的紧靠在一起时，运算量约为 $\mathcal{O}(k^2n)$，而且不能保证特征向量的精度（虽然实际上它几乎是精确的）。

除了 Jacobi 迭代和 Rayleigh 商迭代外，其余算法都需要先将对称矩阵三对角化，这个过程大约需花费 $\frac{4}{3}n^3$ 的工作量，如果需要计算特征向量的话，则运算量约为 $\frac{8}{3}n^3$。

1 Jacobi 迭代

基本思想　通过一系列的 Jacobi 旋转将 A 正交相似于一个对角矩阵：

$$A^{(0)} = A, A(K+1) = J_k^T A^{(k)} J_k, k = 0, 1, \cdots ,$$

且 A(0) 收敛到一个对角矩阵，其中 J^k 为 Jacobi 旋转，即 Givens 变换：

$$J_k = G(i_k, j_k, \theta_k) = \begin{array}{cc} \begin{array}{ccccc} \quad & i_k & \qquad & j_k & \quad \end{array} & \\ \left[\begin{array}{c|ccc|c} I & & & & \\ \hline & \cos\theta_k & \cdots & -\sin\theta_k & \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \\ & \sin\theta_k & \cdots & \cos\theta_k & \\ \hline & & & & I \end{array}\right] & \begin{array}{c} \\ i_k \\ \\ j_k \\ \\ \end{array} \end{array}$$

引理 设 $A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ 是对角矩阵。则存在 Givens 变换 $G \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ 使得 $G^{\mathrm{T}}AG$ 为对角阵。

为了使 $A^{(K)}$ 收敛到一个对角矩阵，其非对角素必须趋向于 0。
记 off(A) 为所有非对角元素的平方和，即

$$\mathrm{off}(A) = \sum_{i\neq j} a_{ij}^2 = \|A^2\|_F^2 - \sum_{i=1}^{n} a_{ii}^2$$

我们的目标就是使得 off(A) 尽快趋向于 0。
引理　设 $A = [a_{ij}]_{n\times n} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵。
$\widehat{A} = [a_{ij}]_{n\times n} = J^TAJ, J = G(i.j, \theta)$, 其中 θ 的选取使得 $\widehat{a}_{ij} = \widehat{a}_{ji} = 0$, 则

$$\mathrm{off}(\widehat{A}) = \mathrm{off}(A) - 2a_{ij}^2$$

算法 1.1 Jacobi 迭代算法

Given a symmetric matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$
if eigenvectors are desired then
  set $J = I$ and shift $= 1$
end if
while not converge do
  choose an index pair (i, j)such that $a_{ij} \neq 0$
  $\tau = (a_{ii} - a_{jj})/(2a - jj)$
  $t = \mathrm{sign}(\tau/(|\tau| + \sqrt{1+\tau^2})$
  $c = 1/\sqrt{1+t^2}, s = c \cdot t$
  $A = G(i, j, \theta)^T A G(i, j, \theta)$
  if shift $= 1$ then
    $J = J \cdot G(i, j, \theta)$
  end if
end while

a_{ij} 的选取问题

一种直观的选取方法就是使得 a_{ij} 为所有非对角元素中绝对值最大的一个，这就是经典 Jacobi 算法。

算法 1.2 经典 Jacobi 迭代算法

Given a symmetric matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$
if eigenvectors are desired then
  set $J = I$ and $\text{shift} = 1$
end if
while $\text{off}(A) > \text{tol}$ do
  choose (i, j)such that $a_{ij} = \max_{k \neq l} |a_{kl}|$
  $\tau = (a_{ii} - a_{jj})/(2a - jj)$
  $t = \text{sign}(\tau/(|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2})$
  $c = 1/\sqrt{1 + t^2}, s = c \cdot t$
  $A = G(i, j, \theta)^T A G(i, j, \theta)$
  if $\text{shift} = 1$ then
    $J = J \cdot G(i, j, \theta)$
  end if
end while

可以证明，经典 Jacobi 算法至少是线性收敛的。

定理 经典 Jacobi 算法1.2，有

$$\mathrm{off}(A^{(k+1)}) \leq \left(1 - \frac{1}{N}\right) \mathcal{O}(\mathrm{off}(A^{(k)}), N = \frac{n(n-1)}{2}$$

故 k 步迭代后，有

$$\mathrm{off}(A^{(k+1)}) \leq \left(1 - \frac{1}{N}\right)^k \mathcal{O}(\mathrm{off}(A^{(0)}) = \left(1 - \frac{1}{N}\right)^k \mathcal{O}(\mathrm{off}(A)$$

事实上，经典 Jacobi 算法最终是二次局部收敛的。定理 经典 Jacobi 算法1.2是 N 步局部二次收敛的，即对足够大的 k，有

$$\mathrm{off}(A^{(k+N)}) = \mathcal{O}(\mathrm{off}^2(A^{(k)}))$$

循环 Jacobi 经典 Jacobi 算法的每一步都要寻找绝对值最大的非对角元，费时不实用。改进：逐行扫描。

算法 1.3 经典 Jacobi 迭代算法 (逐行扫描)

Given a symmetric matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$
if eigenvectors are desired then
  set $J = I$ and shift $= 1$
end if
while $\mathrm{off}(A) > \mathrm{tol}$ do
  for $i = 1$ to $n-1$ do
    for$j = i+1$ to n do
      if $a_{ij} \neq 0$ then
        $\tau = (a_{ii} - a_{jj})/(2a - jj)$
        $t = \mathrm{sign}(\tau/(|\tau| + \sqrt{1+\tau^2})$
        $c = 1/\sqrt{1+t^2}, s = c \cdot t$
        $A = G(i,j,\theta)^T A G(i,j,\theta)$
        if shift $= 1$ then

$J = J \cdot G(i, j, \theta)$
end if
end if
end for
end for
end while

循环 Jacobi 也具有局部二次收敛性。

第五讲 对称矩阵的特征值问题

1 Jacobi 迭代

2 Raylaogh 商迭代

3 对称 QR 迭代

4 分而治之法

5 对分法和逆迭代

6 奇异值分解

7 扰动分析

2 Raylaogh 商迭代 反迭代方法中，以 Rayleigh 商作为位移。
关于 Rayleigh 商迭代的收敛性，我们有下面的结论。

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 对称，且特征值都是单重的。则当误差足够小时，Rayleigh 商迭代中每步迭代所得的正确数字的位数曾至三倍，即 Rayleigh 商迭代是局部三次收敛。

1 Jacobi 迭代

2 Raylaogh 商迭代

3 对称 QR 迭代

4 分而治之法

5 对分法和逆迭代

6 奇异值分解

7 扰动分析

3 对称 QR 迭代 将带位移的隐式 QR 方法运用到对称矩阵，就得到对称 QR 迭代方法。基础步骤：

1. 对称三对角化：利用 Householder 变换，将 A 化为对称三对角矩阵，即计算正交矩阵 Q 使得 $T = QAQ^T$ 为对称三对角矩阵；
2. 使用带（单）位移的隐式 QR 迭代算法计算 T 的特征值与特征向量；
3. 计算 A 的特征向量。

对称三对角化

任何一个对称矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 都可以通过正交变换转化成一个对称三对角矩阵 T。这个过程可以通过 Householder 变换来实现，也可以通过 Givens 变换来实现。

对称 QR 迭代算法的运算量

- 三对角化 $4n^3/3 + \mathcal{O}(n^2)$, 若需计算特征向量，则为 $8n^3/3 + \mathcal{O}(n^2)$；
- 对 T 做带位移的隐式 QR 迭代，每次迭代的运算量为 $6n$；
- 计算特征值，假定每个平均迭代 2 步，则总运算量为 $12n^2$；
- 若要计算 T 的所有特征值和特征向量，则运算量为 $6n^3 + \mathcal{O}(n^2)$；
- 若只要计算 A 的所有特征值，运算量为 $4n^3/3 + \mathcal{O}(n^2)$；
- 若计算 A 的所有特征值和特征向量，则运算量为 $26n^3/3 + \mathcal{O}(n^2)$;

位移的选取——Wilkinson 位移

位移的好坏直接影响到算法的收敛速度。我们可以通过下面的方式来选取位移。设

$$A^{(k)} = \begin{bmatrix} a_1^{(k)} & b_1^{(k)} & & \\ b_1^{(k)} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1}^{k} \\ & & b_{n-1}^{(k)} & a_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

一种简单的位移选取策略就是令 $\sigma_k = a_n(K)$。事实上，$a_n^{(k)}$ 就是收敛到特征向量的迭代向量的 Rayleigh 商。这种位移选取方法几乎对所有的矩阵都有三次渐进收敛速度。但也存在不收敛的例子，故我们需要对其做改进。

Wilkinson 位移：取 $\begin{bmatrix} a_{n-1}^{(k)} & b_{n-1}^{(k)} \\ b_{n-1}^{(k)} & a_n^{(k)} \end{bmatrix}$ 的最接近 $a_n^{(k)}$ 的特征值作为位移。通过计算可得 Wilkinson 位移为

$$\sigma = a_n^{(k)} + \delta - \mathrm{sign}(\delta)\sqrt{\delta^2 + (b_{n-1}^{(k)})^2}$$

, 其中 $\delta =$ frac12$(a_{n-1}^{(k)} - a_n^{(K)})$ 出于稳定性方面的考虑，我们通常用下面的计算公式

$$\sigma = a_n^{(k)} - \frac{(b_{n-1}(k))^2}{\delta + \mathrm{sign}(\delta)\sqrt{\delta^2 + (b_{n-1}^{(k)})^2}} \tag{1}$$

定理　采用 Wilkinson 位移的 QR 迭代时整体收敛的，且至少是线性收敛。事实上，几乎所有的矩阵都是渐进三次收敛的。

例　带 Wilkinson 位移的隐式 QR 迭代算法收敛性演示。

MATLAB 代码：Eig$_\mathrm{T}$riQR.m

1 Jacobi 迭代

2 Raylaogh 商迭代

3 对称 QR 迭代

4 分而治之法

5 对分法和逆迭代

6 奇异值分解

7 扰动分析

4 分而治之法

分而治之法由 Cuppen 于 1981 年首次提出，但直到 1995 年才出现稳定的实现方式，是目前计算所有特征值和特征向量的最快算法。

考虑不可约对称三对角矩阵

$$T = \left[\begin{array}{cccc|cccc} a_1 & b_1 & & & & & & \\ b_1 & \ddots & \ddots & & & & & \\ & \ddots & a_{m-1} & b_{m-1} & & & & \\ & & b_{m-1} & a_m & b_m & & & \\ \hline & & & b_m & a_{m+1} & b_{m+1} & & \\ & & & & b_{m+1} & \ddots & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ & & & & & & b_{n-1} & a_n \end{array}\right]$$

$$= \left[\begin{array}{cccc|ccc} a_1 & b_1 & & & & & \\ b_1 & \ddots & \ddots & & & & \\ & \ddots & a_{m-1} & b_{m-1} & & & \\ & & b_{m-1} & a_m - b_m & & & \\ \hline & & & & a_{m+1} - b_m & b_{m+1} & \\ & & & & b_{m+1} & \ddots & \ddots \\ \end{array}\right] + \left[\begin{array}{c} \\ \hline \\ \end{array}\right.$$

其中 $v = [0, \cdots, 0, 1, 1, 0, \cdots, 0]^T$。

假定 T_1 和 T_2 的特征值已经计算出来，即 $T_1 = Q_1\boldsymbol{\Lambda}_1Q_1^T$，$T_2 = Q_2\boldsymbol{\Lambda}_2Q_2^T$，下面考虑 T 的特征值分解。

$$T = \begin{bmatrix} T_1 & 0 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix} + b_m vv^T = \begin{bmatrix} Q_1\Lambda_1Q_1^T & 0 \\ 0 & Q_2\Lambda_2Q_2^T \end{bmatrix} + b_m vv^T$$
$$= \begin{bmatrix} Q_1 & 0 \\ 0 & Q_2 \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} \Lambda_1 & 0 \\ 0 & \Lambda_2 \end{bmatrix} + b_m uu^T \right) \begin{bmatrix} Q_1 & 0 \\ 0 & Q_2$$

其中

$$u = \begin{bmatrix} Q_1 & 0 \\ 0 & Q_2 \end{bmatrix}^\top, v = \begin{bmatrix} Q_1^T\text{的最后一列} \\ Q_2^T\text{的第一列} \end{bmatrix}$$

令 $a = b_m$，$D = \mathrm{diag}(\Lambda_1, \Lambda_2) = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$，并假定 $d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_n$，则 T 的特征值于 $D + \alpha uu^T$ 的特征值相同。

考虑 $D+\alpha uu^T$ 的特征值
设 λ 是 $D+\alpha uu^T$ 的一个特征值，若 $D-\lambda I$ 非奇异，则

$$\det(D+\alpha uu^T-\lambda I)=\det(D-\lambda I)\cdot\det(I+\alpha(D-\lambda I)^{-1}uu^T)$$

故 $\det(D+\alpha uu^T-\lambda I)=0$。
引理　设 $x,y\in\mathbb{R}^n$，则 $\det(I+xy^T)=1+y^Tx$。
于是

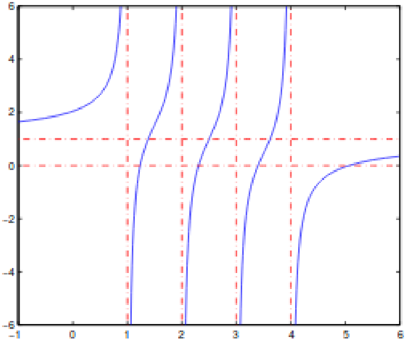
$$\det(I+\alpha(D-\lambda I)^{-1}uu^T)=1+\alpha u^T(D-\lambda I)^{-1}u=1+\alpha\sum_{i=1}^{n}\frac{u_i^2}{d_i-\lambda}\triangleq f(\lambda)$$

故求 A 的特征值等价于求特征方程 $f(\lambda)=0$ 的根。

由于

$$f'(\lambda) = \alpha \sum_{i=1}^{n} \frac{u_i^2}{(d_i - \lambda)}$$

当所有的 d_i 都互不相同，且所有的 u_i 都不为零时，$f(\lambda)$ 在 $\lambda \neq d_i$ 处都是严格单调的。



所以 $f(\lambda)$ 在每隔区间 (d_{i+1}, d_i) 内都有一个根，共 $n-1$ 个，另一个根在 (d_1, ∞)（若 $\alpha > 0$）或（$-\infty, d_n$）若 $\alpha < 0$）中。

由于 $f(\lambda)$ 在每个区间 (d_{i+1}, d_i) 内光滑且严格单调递增（$\alpha > 0$）或递减 $(\alpha < 0)$，所以在实际计算中，可以使用对分法，牛顿法及其变形，或有理逼近等算法求解。通常都很快收敛，一般只需迭代几步即可。

因此，计算一个特征值的运算量约为 $\mathcal{O}(n)$，计算 $D + \alpha\, uu^T$ 的所有特征向量。

引理　设 $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 为对角矩阵，$u \in \mathbb{R}^n$,$\alpha \in \mathbb{R}$，若 λ 是 $D + \alpha\, uu^T$ 的特征值，且 $\lambda \neq d_i$，$i = 1, 2, \cdots, n$，则 $(D - \lambda I)^{-1} u$ 是其对应的特征向量。

算法 4.1 计算对称三对角矩阵的特征值和特征向量的分而治之法

function $[Q, \Lambda] = \mathrm{dc\_eig}(T)$ $\quad \% T = Q\Lambda Q^T$

if T is of 1×1 then

  $Q = 1, \Lambda = T$

  return

end if

form $T = \begin{bmatrix} T_1 & 0 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix} + b_m v v^\top$

$[Q_1, \Lambda_1] = \mathrm{dc\_eig}(T_1)$

$[Q_2, \Lambda_2] = \mathrm{dc\_eig}(T_2)$

form $D + \alpha u u^T$ from $\Lambda_1, \Lambda_2, Q_1, Q_2$

compute the eigenvalues Λ and eigenvectors $\hat{Q}$ of $D + \alpha u u^T$

compute the eigenvalues of T with $Q = \begin{bmatrix} Q_1 & 0 \\ 0 & Q_2 \end{bmatrix} \cdot \hat{Q}$

end

在分而治之法中，计算特征值和计算特征向量是同时进行的。

下面我们详细讨论分而治之算法的几个细节问题：

1. 如何减少运算量；
2. 如何求解特征方程 $f(\lambda) = 0$；
3. 如何稳定的计算特征向量。

(1) 如何减小运算量——收缩技巧（deflation）

分而治之算法的计算复杂性分析如下：用 $t(n)$ 表示对 n 阶矩阵调用函数 dc_eig 的运算量，则

$$
\begin{aligned}
t(n) = & 2t(n/2) && \text{递归调用}dc_eig\text{两次} \\
& + \mathcal{O}(n^2) && \text{计算}D + \alpha uu^T\text{的特征值和特征向量} \\
& + c \cdot n^3 && \text{计算}Q
\end{aligned}
$$

如果计算 Q 时使用的是稠密矩阵乘法，则 $c = 2$；若不计 $\mathcal{O}(n^2)$ 项，则由递归公式 $t(n) = 2t(n/2) + c \cdot n^3$ 可得 $t(n) \approx c \cdot 4n^3/3$。

但事实上，由于收缩现象的存在，常熟 c 通常比 1 小得多。

在前面的算法描述过程中，我们假定 d_i 互不相等且 u_i 不能等于零。

事实上，当 $d_i = d_{i+1}$ 或 $u_i = 0$ 时，d_i 即为 $D + \alpha uu^T$ 的特征值，这种现象我们成为收缩。

在实际计算时，当 $d_i - d_{i+1}$ 或 $|u_i|$ 小于一个给定的阈值时，我们就金斯认为 d_i 为 $D + \alpha uu^T$ 的特征值，即出现收缩现象。

在实际计算中，收缩现象会经常发生，而且会非常频繁，所以我们可以而且应该利用这种有点加快分而治之算法的速度。

由于主要的计算量集中在计算 Q，即算法的最后一步的矩阵的乘积。如果

$u_i = 0$，则 d_i 为特征值，其对应的特征向量 e_i, 即 $\hat{Q}$ 的第 i 列为 e_i，故计算 Q 的第 i 列时不需要做任何的计算。
当 $d_i = d_{i+1}$ 时，也存在一个类似的简化。

(2) 特征方程求解

通常我们可以使用牛顿法来计算特征方程 $f(\lambda)=0$ 的解。当 $d_i \neq d_{i+1}$ 且 $u_i \neq 0$ 时，用牛顿法计算 $f(\lambda)$ 在 (d_{i+1}, d_i) 中的零点 λ_i。如果 $|u_i|$ 小于给定的阈值时，我们可直接将 d_i 作为特征值 λ_i 的一个近似。但当 u_i 很小（却大于给定的阈值）时，此时 $f(\lambda)$ 在区间 $[d_{i+1}, d_i]$ 中的大部分处的斜率几乎为 0（见下图）。这是，如果任取 $[d_{i+1}, d_i]$ 中的一个点作为迭代初始点，经过一次牛顿迭代后，迭代解可能会跑到区间 $[d_{i+1}, d_i]$ 的外面，造成不收敛。

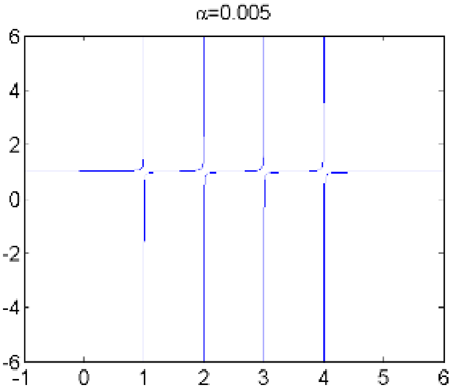


Figure: $f(\lambda) = 1 + 0.005(\frac{1}{4-\lambda} + \frac{1}{3-\lambda} + \frac{1}{2-\lambda} + \frac{1}{1-\lambda})$ 的图像

这时需要采用修正的牛顿法。假设我们已经计算出 λ_i 的一个近似 $\tilde{\lambda}$，下面我们需要从 $\tilde{\lambda}$ 出发，利用牛顿迭代计算下一个近似，直至收敛。我们知道牛顿法的基本原理是使用 $f(\lambda)$ 在点 $\tilde{\lambda}$ 的切线来近似 $f(\lambda)$，并将切线的零点作为下一个近似，即用直线来近似曲线 $f(\lambda)$。
当 u_i 很小时，这种近似方法会出现问题，此时不能使用直线来近似 $f(\lambda)$。这时我们可以寻找其他简单函数 $h(\lambda)$ 来近似 $f(\lambda)$，然后用 $h(\lambda)$ 的零点作为 $f(\lambda)$ 零点的近似，并不断迭代下去，直至收敛。
当然，$h(\lambda)$ 需要满足一定的要求：

1. 必须容易构造；
2. 其零点容易计算；
3. 尽可能与 $f(\lambda)$ 相近。

下面给出构造 $h(\lambda)$ 的一种方法。
因为 d_i 和 d_{i+1} 是 $f(\lambda)$ 的奇点，所以我们令

$$h(\lambda) = \frac{c_1}{d_i - \lambda} + \frac{c_2}{d_{i+1} - \lambda} + c_3$$

其中 c_1, c_2, c_3 为参数。显然，$h(\lambda)$ 的零点很容易计算（与 Newton 法相差无几）。在选取这些参数时，要使得 $h(\lambda)$ 在 $\tilde{\lambda}$ 附近尽可能地接近 $f(\lambda)$。记

$$\begin{aligned} f(\lambda) = 1 + \alpha \sum_{k=1}^{n} \frac{u_k^2}{d_k - \lambda} &= 1 + \alpha (\sum_{k=1}^{i} \frac{u_k^2}{d_k - \lambda} + 1 + \alpha \sum_{k=i+1}^{n} \frac{u_k^2}{d_k - \lambda}) \\ &\triangleq 1 + \alpha \left(\Psi_1(\lambda) + \Psi_2(\lambda) \right) \end{aligned}$$

当 $\lambda \in (d_{i+1}, d_i)$ 时，$\Psi_1(\lambda)$ 为正项和，$\Psi_2(\lambda)$ 为负项的和，因此它们都可以较精确地计算。但如果把它们加在一起时可能会引起对消，从而失去相对精度。因此我们也将 $h(\lambda)$ 写成

$$h(\lambda) = 1 + \alpha (h_1(\lambda) + h_2(\lambda))$$

其中

$$h_1(\lambda) = \frac{c_1}{d_i - \lambda} + \hat{c}_1, \quad h_2(\lambda) = \frac{c_2}{d_{i+1} - \lambda} + \hat{c}_2$$

满足

$$h_1(\tilde{\lambda}) = \Psi_1(\tilde{\lambda}), \quad h_1'(\tilde{\lambda}) = \Psi_1'(\tilde{\lambda})$$
$$h_2(\tilde{\lambda}) = \Psi_2(\tilde{\lambda}), \quad h_2'(\tilde{\lambda}) = \Psi_2'(\tilde{\lambda})$$

即 $h_1(\lambda)$ 和 $h_2(\lambda)$ 分别在点 $\tilde{\lambda}$ 与 $\Psi_1(\lambda)$ 和 $\Psi_2(\lambda)$ 相切。这在数值插值中是常见的条件。容易计算可得

$$\begin{cases} c_1 = \Psi_1'(\tilde{\lambda})\left(d_i - \tilde{\lambda}\right)^2, & \hat{c}_1 = \Psi_1(\tilde{\lambda}) - \Psi_1'(\tilde{\lambda})\left(d_i - \tilde{\lambda}\right) \\ c_2 = \Psi_2'(\tilde{\lambda})\left(d_{i+1} - \tilde{\lambda}\right)^2, & \hat{c}_2 = \Psi_2(\tilde{\lambda}) - \Psi_2'(\tilde{\lambda})\left(d_{i+1} - \tilde{\lambda}\right) \end{cases} \tag{2}$$

所以，最后取

$$h(\lambda) = 1 + \alpha\left(\hat{c}_1 + \hat{c}_2\right) + \alpha\left(\frac{c_1}{d_i - \lambda} + \frac{c_2}{d_{i+1} - \lambda}\right) \tag{3}$$

这就是迭代函数。

算法 4.2 修正的 Newton 算法

1: setk $= 0$
2: choose an initial guess $\lambda_0 \in [d_{i+1}, d_i]$
3: while not convergence do
4: let$\tilde{\lambda} = \lambda_k$and compute $c_1, c_2, \hat{c}_1, \hat{c}_2$from 2
5: set $k = k + 1$
6: compute the solution $\lambda_k$of $h(\lambda)$defined by 3
7: end while

(3) 计算特征向量的稳定算法

设 λ_i 是 $D+\alpha uu^T$ 的特征值，则根据引理 4.2，可利用公式 $(D-\lambda_i I)^{-1}u$ 来计算其对应的特征向量。但遗憾的是，当相邻的两个特征值非常接近时，这个公式可能不稳定。即当 λ_i 与 λ_{i+1} 非常接近时，他们都靠近 d_{i+1}（这里假定 $\lambda_i \in (d_{i+1}, d_i)$），在计算 $d_{i+1}-\lambda_i$ 和 $d_{i+1}-\lambda_{i+1}$ 时会存在对消，这就可能损失有效数字，产生较大的相对误差，从而导致 $(D-\lambda_i I)^{-1}u$ 与 $(D-\lambda_{i+1} I)^{-1}u$ 的计算时不准确的，正交性也会失去。下面的定理可以解决这个问题。

定理（L⊠wner） 设对角阵 $D = \mathrm{diag}\,(d_1, d_2, \ldots, d_n)$ 满足 $d_1 > d_2 > \cdots > d_n$, 若矩阵 $\hat{D} = D + \hat{u}\hat{u}^{\top}$ 的特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ 满足交错性质

$$\lambda_1 > d_1 > \lambda_2 > d_2 > \cdots > \lambda_n > d_n \tag{4}$$

则向量 $\hat{u}$ 的分量满足

$$|\hat{u}_i| = \left(\frac{\prod_{k=1}^{n} (\lambda_k - d_i)}{\prod_{k=1, k \neq i}^{n} (d_k - d_i)} \right)^{1/2} \tag{5}$$

因此，我们可以采用公式5来计算特征向量。这样就尽可能的避免了出现分母很小的情形。

箭型分而治之法

分而治之算法于 1981 年被首次提出, 但直到 1995 年才由 Gu 和 Eisenstat 给出了一种快速稳定的实现方式, 称为箭型分而治之法 (Arrowhead Divide-and-Conquer, ADC). 他们做了大量的数值试验, 在试验中, 当矩阵规模不超过 6 时, 就采用对称 QR 迭代来计算特征值和特征向量。在对特征方程求解时, 他们采用的是修正的有理逼近法。数值结果表明, ADC 算法的计算精度可以与其他算法媲美, 而计算速度通常比对称 QR 迭代快 5 至 10 倍, 比 Cuppen 的分而治之法快 2 倍。详细介绍参见相关文献。

1 Jacobi 迭代

2 Raylaogh 商迭代

3 对称 QR 迭代

4 分而治之法

5 对分法和逆迭代

6 奇异值分解

7 扰动分析

5 对分法和逆迭代 对分法的基本思想是利用惯性定理来计算所需的部分特征值。

定义 设 A 为对称矩阵，则其惯性定义为

$$(A) = (\nu, \zeta, \pi)$$

其中 ν, ζ, π 分别表示 A 的负特征值，零特征值和正特征值的个数。

定理 (Sylvester 惯性定理) 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵，$X \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 非奇异，则 $X^T AX$ 与 A 有相同的惯性。

利用 LU 分解可得 $A - zI = LDL^{\top}$，其中 L 为奇异下三角矩阵，D 为对角阵，则

$$(A - zI) = \text{Inertia}(D)$$

由于 D 时对角矩阵，所以 $\text{Inertia}(D)$ 很容易计算。
设 $\alpha \in \mathbb{R}^n$，记 $\text{Negcount}(A, \alpha)$ 为小于 α 的 A 的特征值的个数，即

$$\text{Negcount}(A, \alpha) = \#(\lambda(A) < \alpha)$$

设 $\alpha_1 < \alpha_2$，则 A 在区间 $[\alpha_1, \alpha_2)$ 中的特征值个数为

$$(A, \alpha_2) - \text{Negcount}(A, \alpha_1)$$

。
如果 $\alpha_2 - \alpha_1 < \text{tol}$（其中 $\text{tol} \ll 1$ 为事先给定的阈值），且 A 在 $[\alpha_1, \alpha_2)$ 中有特征值，则我们可将 $[\alpha_1, \alpha_2)$ 中的任意一个值作为 A 在该区间中的特征值的近似。
由此我们可以给出下面的对分法。

算法 5.1 计算 A 在 $[a,b)$ 中的所有特征值

Let tolbe a given threshold
compute n_a =Negcount (A,a)
compute n_b =Negcount (A,b)
if $n_a = n_b$then
  return   % 此时 $[a,b)$ 中没有 A 的特征值
end if
put (a, n_a, b, n_b)onto worklist
  %worklist 中的元素时“四元素对，即由四个数组成的数对
while worklist not empty do
  remove$(low, n_{low}, up, n_{up})$from the worklist
  %$(low, n_{low}, up, n_{up})$ 是 worklisth 中的任意一个元素
  if$(up - low) < tol$ then
    print ” There are $n_{up} - n_{low}$eigenvalues in[low,up)”
  else
    compute $mid = (low + up)/2$

computen$_{\mathrm{mid}}$ = Negcount (A, mid)
if $(n_{\mathrm{mid}} > n_{\mathrm{low}})$ then
    put $(\mathrm{low}, n_{\mathrm{low}}, \mathrm{mid}, n_{\mathrm{mid}})$onto worklist
end if
if $(n_{\mathrm{up}} > n_{\mathrm{mid}})$ then
    $(\mathrm{mid}, n_{\mathrm{mid}}, \mathrm{up}, n_{\mathrm{up}})$onto worklist
end if
end if
end while

对分法的主要运算量集中在计算 Negcount (A, z)。通常是事先将 A 转化成对称三对角矩阵，这样计算 $A - zI$ 的 LDL^T 分解就非常简单：

$$A - zI = \begin{bmatrix} a_1 - z & b_1 & & & \\ b_1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ & & b_{n-1} & a_n - z \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & l_{n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & l_{n-1} \\ & & & 1 \end{bmatrix} \triangleq$$

利用待定系数法，可以得到下面的递推公式

$$d_1 = a_1 - z, \quad d_i = (a_i - z) - \frac{b_{i-1}^2}{d_{i-1}}, \quad i = 2, 3, \dots, n \tag{6}$$

用上面的公式计算 d_i 的运算量约为 $4n$。

注意这里没有选主元，但针对对称三对角矩阵，该算法是非常稳定的，即使当 d_i 有可能很小时，算法依然很稳定。

定理 [Demmel’97]利用公式6计算所得的 d_i 与精确计算 $\hat{A}$ 的 $\hat{d}_i$ 有相同的符号，故有相同的惯性。这里 $\hat{A}$ 与 A 非常接近，即

$$\hat{A}(i,i) = a_i, \quad \hat{A}(i,i+1) = b_i\,(1+\varepsilon_i)$$

其中，$|\varepsilon_i| \leq 2.5\varepsilon + O\left(\varepsilon^2\right)$，这里 ε 为机器精度。

- 由于单独调用一次 Negcount 的运算量为 4n，故计算 k 个特征值的总运算量约为 O(kn)；
- 当当特征值计算出来后, 我们可以使用带位移的逆迭代来计算对应的特征向量。通常只需迭代 1 至 2 次即可, 由于 A 是三对角矩阵, 故计算每个特征向量的运算量为 O(n)；
- 当特征值紧靠在一起时, 计算出来的特征向量可能会失去正交性, 此时需要进行再正交化, 可通过 MGS 的 QR 分解来实现。

1 Jacobi 迭代

2 Raylaogh 商迭代

3 对称 QR 迭代

4 分而治之法

5 对分法和逆迭代

6 奇异值分解

7 扰动分析

6 奇异值分解

奇异值分解 (SVD) 具有十分广泛的应用背景, 因此, 如何更好更快地计算一个给定矩阵的 SVD 是科学与工程计算领域中的一个热门研究课题, 吸引了众多专家进行这方面的研究, 也涌现出了许多奇妙的方法. 本章主要介绍计算 SVD 的常用算法。

对任意矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，其奇异值与对称矩阵 A^TA，AA^T 和 $\begin{bmatrix} 0 & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix}$ 的特征值是密切相关的，故理论上计算对称特征值的算法都可以用于计算奇异值。但在实际计算中，我们通过可以利用 SVD 的特殊结构使得算法更加有效和准确。

与计算对称矩阵的特征值累死，计算一个矩阵 A 的奇异值分解的算法通常分为一下几个步骤（Jacobi 算法除外）：

1. 将 A 二对角化：$B = U_1^T A V_1$，其中 B 为上二对角矩阵，U_1, V_1 为正交阵；
2. 计算 B 的 SVD：$B = U_2 \sum V_2^T$，其中 $\sum$ 为对角阵，U_2, V_2 为正交阵；
3. 合并得到 A 的 SVD：$A = U_1 B V_1^T = (U_1U_2)B(V_1V_2)^T$。

6.1 二对角化

我们知道。对称矩阵可以通过一系列 Householder 变换转化为对称三对角矩阵。对于一般矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 我们也可以通过 Householder 变换，将其转化为而对角矩阵，即计算正交矩阵 U_1 和 V_1 使得

$$U_1^T A V_1 = B \tag{7}$$

其中 B 是一个实（上）二对角矩阵。这个过程就称为二对角化。
需要注意的是，与对称矩阵的对称三对角化不同，A 与 B 是不相似的。

设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，二对角化过程大致如下：

1. 首先确定一个 Household 矩阵 $H_1 \in \mathbb{R}^{m\times n}$，使得 H_1A 的第一节除第一个元素外，其他分量都为零，即

$$H_1A = \begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{bmatrix}$$

2. 再确定一个 Household 矩阵 $\tilde{H}_1 \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$，把 H_1A 的第一行的第 3 至第 n 个元素化为零，即

$$H_1A\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{H}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & \cdots & * & \\ 0 & * & \cdots & * & \\ 0 & * & \cdots & * & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ 0 & * & \cdots & * & \end{bmatrix}$$

3. 重复上面的过程，直到把 A 最终化为而对角矩阵。

有了分解7以后，我们可得

$$A^\top A = \left(U_1 B V_1^\top\right)^\top U_1 B V_1^\top = V_1 B^\top B V_1^\top$$

即 $V_1^\top A^\top A V_1 = B^\top B$。由于 $B^T B$ 是对称三对角的，所以这就相当于将 $A^T A$ 三对角化。

整个二对角化过程的运算量约为 $4mn^2 + 4m^2 n - 4n^3/3$。若不需要计算 U_1 和 V_1，则运算量约为 $4mn^2 - 4n^3/3$。

二对角矩阵的奇异值分解

设 $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是一个两对角矩阵 $B = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & & \\ & & \ddots & b_{n-1} & \\ & & & a_n & \end{bmatrix}$，则下面三种方法均可将计算 B 的 SVD 转化成计算对称三对角矩阵的特征分解：

1. 令 $A = \begin{bmatrix} 0 & B^\top \\ B & 0 \end{bmatrix}$，置换阵 $P = [e_1, e_{n+1}, e_2, e_{n+2}, \ldots, e_n, e_{2n}]$，则 $T_{ps} = P^\top AP$ 是对称三对角矩阵，且 T_{ps} 的主对角线元素全为 0，次对角线元素为 $a_1, b_1, a_2, b_2, \ldots, a_{n-1}, b_{n-1}, a_n$。若 (λ_i, x_i) 是 T_{ps} 的一个特征对，则

$$\lambda_i = \pm\sigma_i, \quad Px_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} v_i \\ \pm u_i \end{bmatrix}$$

，其中 σ_i 为 B 一个奇异值，u_i 和 v_i 分别为对应的左和右奇异向量。

2. 令 $T_{BB^\top}=BB'$，则

$$T_{BB^\top}=\begin{bmatrix} a_1^2+b_1^2 a_2 b_1 & & & \\ a_2 b_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & a_{n-1}^2+b_{n-1}^2 a_n b_{n-1} & \\ & & a_n b_{n-1} & a_n^2 \end{bmatrix}$$

$T_{BB^\top}$ 的特征值为 B 的奇异值的平方，且 $T_{BB^\top}$ 的特征向量为 B 的左奇异向量。

3. 令 $T_{BB^\top}=BB'$，则

$$T_{B^\top B}=\begin{bmatrix} a_1^2 & a_1 b_1 & & \\ a_1 b_1 & a_2^2+b_1^2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & a_{n-1}b_{n-1} \\ & & a_{n-1}b_{n-1} & a_n^2+b_{n-1}^2 \end{bmatrix}$$

$T_{B^\top B}$ 的特征值为 B 的奇异值的平方，且 $T_{B^\top B}$ 的特征向量为 B 的右奇异向量。

理论上，我们可以直接使用 QR 迭代、分而治之法或带反迭代的对分法，计算三对角矩阵的 $T_{ps}, T_{BB^\top}$ 和 $T_{B^\top B}$ 的特征值和特征向量。但一般来说，这种做法并不是最佳的，原因如下：

1. 对 T_{ps} 做 QR 迭代并不划算，因为 QR 迭代计算所有的特征值和特征向量，而事实上只要计算正的特征值即可；
2. 直接构成 $T_{BB^\top}$ 或 $T_{B^\top B}$ 是数值不稳定的。事实上，这样做可能会使得 B 的小奇异值的精度丢失一半。

下面是一些奇异值分解的比较实用的算法。

1. **Golub-Kahan SVD 算法**: 由 Golub 和 Kahan 于 1965 年提出, 是一种十分稳定且高效的计算 SVD 的算法。主要思想是将带位移的对称 QR 迭代算法隐式地用到 $B^{T}B$ 上, 在该算法中, 并不需要显示地把 $B^{T}B$ 计算出来。该算法也通常就称为 SVD 算法, 是一个基本且实用的算法, 目前仍然是计算小规模矩阵奇异值分解的常用算法。
2. **dqds 算法**: 由 Fernando 和 Parlett 于 1994 年提出, 是计算二对角矩阵所有奇异值的最快算法, 而且能达到很高的相对精度, 包括奇异值很小的情形。该算法主要基于对 $B^{T}B$ 的 Cholesky 迭代, 可以看作是 LR 迭代算法的改进。由于 LR 迭代算法在一定条件下与对称 QR 算法是等价的, 因此该算法也可以看作是 QR 迭代的变形。
3. **分而治之法**：该算法是计算维数 $n \geq 25$ 的矩阵的所有奇异值和奇异向量的最快算法，但不能保证小奇异值的相对精度，即 σ_i 的相对精度为 $O(\varepsilon)\sigma_1$，而不是 $O(\varepsilon)\sigma_i$。
4. **对分法和反迭代**: 主要用于计算某个区间内的奇异值及对应的奇异向量, 能保证较高的相对精度。
5. **Jacobi 迭代**：可隐式地对 AA^{T} 或 $A^{T}A$ 实施对称 Jacobi 迭代，能保证较高的相对精度。最近，Z.Drmac 和 K.Veseli⊠ 改进了最初的 Jacobi 算法, 使其变成一个速度快、精度高的实用算法。

在这里，我们简要介绍 Golub-Kahan SVD 算法, dqds 算法和 Jacobi 迭代。

6.2 Golub-Kahan SVD 算法

该算法主要思想是将带位移的对称 QR 迭代算法隐式地用到 B^TB 上，而无需将 B^TB 显示的计算出来。

算法基本框架

Golub-Kahan SVD 算法有时也简称 SVD 算法, 其基本框架是:

- 将矩阵 A 二对角化，得到上二对角矩阵 B；
- 用隐式 QR 迭代计算 B^TB 的特征值分解，即

$$B^\top B = Q\Lambda Q^\top, \quad \Lambda = \operatorname{diag}\left(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \ldots, \sigma_n^2\right) \tag{8}$$

- 计算 BQ 的列主元 QR 分解，即

$$(BQ)P = UR \tag{9}$$

其中 P 是置换矩阵，U 是正交矩阵，R 是上三角矩阵。

由8可知

$$(BQ)^\top BQ = \Lambda$$

因此 BQ 是列正交矩阵 (但不是单位列正交)。再由9可知 $R = U^T(BQ)P$ 也是列正交矩阵。又 R 是上三角矩阵，所以 R 必定是对角矩阵。令 $V = QP$,

则由9可知

$$U^{T}BV = R$$

这就是二对角矩阵 B 的奇异值分解。

算法的具体实现参见相关文献

6.3 dqds 算法

我们首先介绍针对实对称正定矩阵的 LR 算法, 该算法思想与 QR 迭代算法类似, 但提出时间更早。

算法 6.1 带位移的 LR 算法

1: Let T_0 be a given real symmetric positive definite matrix
2: set $i = 0$
3: while not converge do
4:     choose a shiftτ_i^2 satisfying $\tau_i^2 < \min\{\lambda(T_i)\}$
5:     compute B_i such that $T_i - \tau_i^2 I = B_i^\top B_i$ %Cholesky factorization
6:     $T_{i+1} = B_i B_i^\top + \tau_i^2 I$
7:     $i = i + 1$
8: end while

LR 迭代算法在形式上与 QR 迭代算法非常类似。事实上，对于不带位移的 LR 迭代算法，我可以证明，两步 LR 迭代等价于一步 QR 迭代。

引理　设 $\tilde{\mathrm{T}}$ 是不带位移的 LR 算法迭代两步后生成的矩阵，$\hat{\mathrm{T}}$ 是不带唯一的 QR 算法迭代一步后生成的矩阵，则 $\tilde{\mathrm{T}} = \hat{\mathrm{T}}$。

1. LR 算法中要求 T_0 对称正定，但并不一定是三对角矩阵；
2. 由该引理可知，QR 算法与 LR 算法有相同的收敛性。

dqds 算法

该算法是针对三对角的对称正定矩阵 B^TB，其中 B 是而对角矩阵。在数学上, dqds 算法与 LR 算法是等价的, 但在该算法中, 我们是直接通过 B_i 来计算 B_{i+1}, 从而避免计算中间矩阵 T_{i+1}，这样也就尽可能的避免了由于计算 $B_iB_i^T$ 而可能带来的数值不稳定性。

下面推导如何从 B_i 直接计算 B_{i+1}。设

$$B_i = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & \\ & a_2 & \ddots & \\ & & \ddots & b_{n-1} \\ & & & a_n \end{bmatrix}, \quad B_{i+1} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_1 & \tilde{b}_1 & & \\ \tilde{a}_2 & \ddots & & \\ & \ddots & & \tilde{b}_{n-1} \\ & \tilde{a}_n & & \end{bmatrix}$$

为了书写方便，我们记 $b_0 = b_n = \tilde{b}_0 = \tilde{b}_n = 0$。由 LR 算法 6.1 可知

$$B_{i+1}^\top B_{i+1} + \tau_{i+1}^2 I = B_i B_i^\top + \tau_i^2 I$$

比较等式两边矩阵的对角线和上对角线元素，可得

$$\tilde{a}_k^2 + \tilde{b}_{k-1}^2 + \tau_{i+1}^2 = a_k^2 + b_k^2 + \tau_i^2, \quad k = 1, 2, \ldots, n$$

$$\tilde{a}_k \tilde{b}_k = a_{k+1} b_k \quad 或 \quad \tilde{a}_k^2 \tilde{b}_k^2 = a_{k+1}^2 b_k^2, \quad k = 1, 2, \ldots, n-1$$

记 $\delta = \tau_{i+1}^2 - \tau_i^2, p_k = a_k^2, q_k = b_k^2, \tilde{p}_k = \tilde{a}_k^2, \tilde{q}_k = \tilde{b}_k^2$，则可得 qds 算法：

算法 6.2 qds 算法的单步 $(B_i \to B_{i+1})$

1: $\delta = \tau_{i+1}^2 - \tau_i^2$

2: for $k = 1$ to $n-1$ do

3: $\quad \tilde{p}_k = p_k + q_k - \tilde{q}_{k-1} - \delta$

4: $\tilde{q}_k = q_k \cdot (p_{k+1}/\tilde{p}_k)$

5: end for

6: $\tilde{p}_n = p_n - \tilde{q}_{n-1} - \delta$

qds 算法中的每个循环仅需 5 个浮点运算，所以运算量较少。
为了体验算法的精确性，我们引入一个辅助变量 $d_k \triangleq p_k - \tilde{q}_{k-1} - \delta$，则

$$\begin{aligned} d_k &= p_k - \tilde{q}_{k-1} - \delta \\ &= p_k - \frac{q_{k-1} p_k}{\tilde{p}_{k-1}} - \delta \\ &= p_k \cdot \frac{\tilde{p}_{k-1} - q_{k-1}}{\tilde{p}_{k-1}} - \delta \\ &= p_k \cdot \frac{p_{k-1} - \tilde{q}_{k-2} - \delta}{\tilde{p}_{k-1}} - \delta \\ &= \frac{p_k}{\tilde{p}_{k-1}} \cdot d_{k-1} - \delta \end{aligned}$$

于是就可得到 dqds 算法。

算法 6.3　dqds 算法的单步 ($B_i \to B_{i+1}$)

1: $\delta = \tau_{i+1}^2 - \tau_i^2$
2: $d_1 = p_1 - \delta$
3: for $k = 1$ to $n-1$ do
4: $\quad \tilde{p}_k = d_k + q_k$
5: $\quad t = p_{k+1}/\tilde{p}_k$
6: $\quad \tilde{q}_j = q_k \cdot t$
7: $\quad d_{k+1} = d_k \cdot t - \delta$
8: end for
9: $\tilde{p}_n = d_n$

dqds 算法的运算量与 dqs 差不多，但更精确。

下面的定理显示了 dqds 算法的高精度性质。

定理 以浮点运算对 B 做单步 dqds 迭代，得到矩阵 $\tilde{B}$，该过程等价于

1. 对 B 的每个元素座椅而小德相对扰动（不超过 1.5ε），得到 $\tilde{B}$；
2. 对 $\tilde{B}$ 应用精确的 dqds 算法的单步，得到 $\overline{B}$;
3. 对 $\overline{B}$ 的每个元素做一个小的相对扰动（不超过 ε），得到 $\tilde{B}$。

因此，B 和 $\tilde{B}$ 的奇异值满足高的相对精度。

关于 dqds 算法中位移的选取，以及如何判断收敛性，可以参见相关文献。

6.4 Jacobi 算法

本节讨论对矩阵 $M = A^T A$ 实施隐式的 Jacoi 算法来计算 A 的奇异值。

我们知道，Jacobi 算法的每一步就是对矩阵作 Jacobi 旋转，即 $A^T A \to J^T A^T A J$，其中 J 的选取将两个非对角元化为 0。在实际计算中，我们只需计算 AJ，故该算法称为单边 Jacobi 旋转。

算法 6.4　单边 Jacobi 旋转的单步

% 对 $M = A^T A$ 作 Jacobi 旋转，将 $M(i.j), M(j, i)$ 化为 0

```
Compute m_ii = (A^T A)_ii, m_ij = (A^T A)_ij, m_jj = (A^T A)_jj
if m_ij is not small enough then
    τ = (m_ii − m_jj) / (2 · m_ij)
    t = sign(τ)/ (|τ| + √(1 + τ^2))
    c = 1/√(1 + t^2)
    s = c · t
    A = AG(i, j, θ)        % G(i, j, θ) 为 Givens 变换
    if eigenvectors are desired then
        J = J · G(i, j, θ)
    end if
end if
```

在上面算法的基础上，我们可以给出完整的单边 Jacobi 算法。blue算法 6.5　单边 Jacobi 算法：计算 $A = U\sum V^T$

```
while A^T A is not diagonal enough do
    for i = 1 to n − 1do
        for j = i + 1to n do
            调用单边 Jacobi 旋转
        end for
    end for
end while
compute σ_i = ||A(:, i)||_2, i = 1, 2, . . . n
U = [u_1, . . . , u_n]with u_i = A(:, i)/σ_i
V = J
```

Jacobi 算法的特点

- 不需要双对角化，这样可以避免双对角化引入的误差；
- 可以达到相对较高的计算精度；
- 速度较慢。(目前已有快速的改进算法)

定理　设 $A = DX \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其中 D 为非奇异对角阵，X 非奇异。设 $\hat{A}$ 是按浮点运算单边 Jacobi 旋转 m 次后所得到的矩阵。若 A 和 $\hat{A}$ 的奇异值分别为 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_n$ 和 $\hat{\sigma}_1 \geq \hat{\sigma}_2 \geq \ldots \geq \hat{\sigma}_n$, 则

$$\frac{|\hat{\sigma}_i - \sigma_i|}{\sigma_i} \leq O(m\varepsilon)\kappa(X)$$

故 X 的条件数越小，计算矩阵 A 的奇异值时相对误差越小。

1. Jacobi 迭代
2. Raylaogh 商迭代
3. 对称 QR 迭代
4. 分而治之法
5. 对分法和逆迭代
6. 奇异值分解
7. 扰动分析

7 扰动分析

设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵，则存在一个蒸饺矩阵 Q 使得

$$A = Q\Lambda Q^T$$

其中 $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$ 是一个实对角矩阵。
这里的 λ_i 就是 A 的特征值，我们假设 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$。令 $Q = [q_1, q_2, \ldots, q_n]$，则 q_i 就是 λ_i 对应的单位正交特征向量。
关于对称矩阵特征值问题的扰动理论, 这里只做一些简单介绍, 若要深入了解这方面的信息, 可以参考相关文献。

7.1 特征值与 Rayleigh 商

定义 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵，向量 $x \in \mathbb{R}^n$ 非零，则 x 关于 A 的Rayleigh 商定义为：

$$\rho(x, A) = \frac{x^\top A x}{x^\top x}$$

有时简记为 $\rho(x)$。

下面是关于 Rayleigh 商的一些基本性质：

1. $\rho(\alpha x) = \rho(x), \forall \alpha \in \mathbb{R}, \alpha \neq 0$;
2. $\rho(q_i) = \lambda_i, i = 1, 2, \ldots, n$;
3. 设 $x = \alpha_1 q_1 + \alpha_2 q_2 + \cdots + \alpha_n q_n$，则

   $$\rho(x) = \frac{\alpha_1^2 \lambda_1 + \alpha_2^2 \lambda_2 + \cdots + \alpha_n^2 \lambda_n}{\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \cdots + \alpha_n^2}$$

   ;
4. $\lambda_n \leq \rho(x) \leq \lambda_1, |\rho(x)| \leq \|A\|_2$。

Courant-Fischer 极小极大定理

实对称矩阵的特征值与 Rayleigh 商之间的一个基本性质是 Courant-Fischer 极小极大定理。

定理 (Courant-Fischer)　设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵，其特征值为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$，则有

$$\lambda_k = \max_{\mathbb{U}\in\mathbb{S}_k^n} \min_{x\in\mathbb{U},x\neq 0} \frac{x^\top Ax}{x^\top x} = \min_{\mathbb{V}\in\mathbb{S}_{n-k+1}^n} \max_{x\in\mathbb{V},x\neq 0} \frac{x^\top Ax}{x^\top x}$$

其中 S_i^n 表示 $\mathbb{R}^n$ 中所欲 i 维子空间构成的集合，当

$$\mathbb{U} = \operatorname{span}\{q_1,\ldots,q_k\}, \quad \mathbb{V} = \operatorname{span}\{q_k,\ldots,q_n\}, \quad x = q_k$$

时，上式中的等号成立。

Rayleigh-Ritz 定理

当 $k=1$ 和 $k=n$ 时, 就可以得到下面的定理.

定理 (Rayleigh-Ritz)　设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵，其特征值为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$，则有

$$\lambda_1 = \max_{x\in\mathbb{R}^n, x\neq 0} \frac{x^\top Ax}{x^\top x}, \quad \lambda_n = \min_{x\in\mathbb{R}^n, x\neq 0} \frac{x^\top Ax}{x^\top x}$$

特征值分割定理

由极大极小定理，我们可以得到下面的特征值分隔定理。

定理（分割定理）　设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵，$B = Q^T A Q$，其中 $Q \in \mathbb{R}4^{n\times(n-1)}$ 满足 $Q^T Q = I_{n-1}$。再设 A 和 B 的特征值分别为

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n \quad \text{和} \quad \tilde{\lambda}_1 \geq \tilde{\lambda}_2 \geq \cdots \geq \tilde{\lambda}_{n-1}$$

则有

$$\lambda_1 \geq \tilde{\lambda}_1 \geq \lambda_2 \geq \tilde{\lambda}_2 \cdots \geq \tilde{\lambda}_{n-1} \geq \lambda_n$$

。

特别地，在上述定理中，取 $Q = [e_1, \ldots, e_{i-1}, e_{i+1}, \ldots, e_n]$，则可以得到下面的结论。

推论　设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵，$\tilde{A}$ 是 A 的一个 $n-1$ 阶主子矩阵，A 和 $\tilde{A}$ 的特征值分别为

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n \quad \text{和} \quad \tilde{\lambda}_1 \geq \tilde{\lambda}_2 \geq \cdots \geq \tilde{\lambda}_{n-1}$$

则有

$$\lambda_1 \geq \tilde{\lambda}_1 \geq \lambda_2 \geq \tilde{\lambda}_2 \cdots \geq \tilde{\lambda}_{n-1} \geq \lambda_n$$

。

反复应用上面的推论，即可得到下面的结论。

推论　设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵，$\tilde{A}$ 是 A 的一个 k 阶主子矩阵 $(1 \le k \le n-1)$，A 和 $\tilde{A}$ 的特征值分别为

$$\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \ge \lambda_n \quad \text{和} \quad \tilde{\lambda}_1 \ge \tilde{\lambda}_2 \ge \cdots \ge \tilde{\lambda}_{n-1}$$

则有

$$\lambda_i \ge \tilde{\lambda}_i \ge \lambda_{n-k+i}, \quad i = 1, 2, \ldots, k$$

。

对称矩阵特征值的扰动分析

设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对称矩阵，扰动矩阵 $E \in \mathbb{R}^{n\times n} E \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 都是对火车呢就在，下面讨论 $A + E$ 的特征值与 A 的特征值之间的关系。

由极小极大定理，我们可以证明下面的性质。

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $B = A + E \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 都是对称矩阵，其特征值分别为

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n \quad \text{和} \quad \tilde{\lambda}_1 \geq \tilde{\lambda}_2 \geq \cdots \geq \tilde{\lambda}_{n-1}$$

假定 E 的最大特征值和最小特征值分别为 μ_1 和 μ_n，则有

$$\lambda_i + \mu_1 \geq \tilde{\lambda}_i \geq \lambda_i + \mu_n, \quad i = 1, 2, \ldots, n$$

Weyl 定理

根据这个定理，我们可以得到下面的 Weyl 定理。

定理（Weyl）　设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $B = A + E \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 都是对称矩阵，其特征值分别为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ 和 $\tilde{\lambda}_1 \geq \tilde{\lambda}_2 \geq \cdots \geq \tilde{\lambda}_{n-1}$，则

$$\left|\tilde{\lambda}_j - \lambda_j\right| \leq \|E\|_2, \quad j = 1, 2, \ldots, n$$

。

该定理的结论可以推广到奇异值情形。

我们首先给出下面的引理。

引理 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}(m \geq n)$ 的奇异值分解为 $A = U\sum V$，其中 $U = [u_1, \cdots, u_n] \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 为列正交矩阵，$V = [v_1, \cdots v_n] \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 为正交矩阵，$\sum = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$。将 U 扩展成 $n \times n$ 的正交矩阵 $[U, \check{U}] = [u_1, \ldots, u_n, \tilde{u}_1, \ldots, \tilde{u}_{m-n}]$，令

$$H = \begin{bmatrix} 0 & A^\top \\ A & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+n)\times(m+n)} 4$$

则 H 对称，且特征值为 $\pm\sigma_i$ 和 0(其中 0 至少为 $m-n$ 重特征值)，对应的特征向量分别为 $\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{bmatrix} v_i \\ \pm u_i \end{bmatrix}$，$i = 1, 2, \ldots, n$，$\begin{bmatrix} 0 \\ \tilde{u}_j \end{bmatrix}$,$j = 1, 2, \ldots, m-n$。

由上面的引理和 Weyl 定理立即可得

定理　设 $A B \in \mathbb{R}^{m\times n}(m \geq n)$, 他们的奇异值分解为 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n$ 和 $\tilde{\sigma}_1 \geq \tilde{\sigma}_2 \geq \cdots \geq \tilde{\sigma}_n$，则

$$\left|\tilde{\sigma}_j - \sigma_j\right| \leq \|B - A\|_2, \quad j = 1, 2, \ldots, n$$

7.3 对称矩阵特征向量的扰动

定义 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 的特征值为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$，则 λ_i 与其余特征值之间的间隙 (gap) 定义为

$$\mathrm{gap}\left(\lambda_i, A\right) = \min_{j\neq i} \left|\lambda_j - \lambda_i\right|$$

有时简记为 $\mathrm{gap}(\lambda_i)$。

特征向量的没干系那个依赖于其对应的特征值得 gap，一般来说，gap 越小，特征向量越敏感。

例　设

$$A = \begin{bmatrix} 1+g \\ 1 \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} 0 \\ \varepsilon \\ \varepsilon \end{bmatrix}, \quad (0 < \varepsilon < g)$$

则 A 的特征值为 $\lambda_1 = 1+g, \lambda_2 = 1$，对应的单位特征向量为 $q_1 = e_1 q_2 = e_2$。$A+E$ 的特征值为 $\hat{\lambda}_{1,2} = 1 + \left(g \pm \sqrt{g^2+4\varepsilon^2}\right)/2$，对应的单位特征向量为

$$\hat{q}_1 = \beta_1 \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\sqrt{1+4\varepsilon^2/g^2}-1}{2\varepsilon/g} \end{bmatrix} = \beta_1 \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\sqrt{\left(1+2\varepsilon^2/g^2\right)^2-4(\varepsilon/g)^4}-1}{2\varepsilon/g} \end{bmatrix}$$

$$\approx \beta_1 \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\left(1+2\varepsilon^2/g^2\right)-1}{2\varepsilon/g} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon^2/g^2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \varepsilon/g \end{bmatrix}$$

$$\hat{q}_2 = \beta_2 \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{1}{2\varepsilon/g} \end{bmatrix} \approx \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon^2/g^2}} \begin{bmatrix} -\varepsilon/g \\ 1 \end{bmatrix}$$

其中 β_1, β_2 为规范化因子。故特征向量的扰动约为 ε / g，与特征值的间隙 $\mathrm{gap}\left(\lambda_{\mathrm{i}}, \mathrm{A}\right) = \mathrm{g}$ 成反比。

定理 设 $A = Q\Lambda Q^T$he 和 $A + E = \tilde{Q}\tilde{\Lambda}\tilde{Q}^T$ 分别为对称矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $A + E \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 的特征值分解，其中 $Q = [q_1, q_2, \dots, q_n]$ 和 $\tilde{Q} = [\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \dots, \tilde{q}_n]$ 均为正交矩阵，且 $\tilde{q}_i$ 为 q_i 对应的扰动特征向量。用 θ_i 表示 q_i 和 $\tilde{q}_i$ 之间的锐角，则当 $\mathrm{gap}\,(\lambda_i, A) > 0$ 时

$$\frac{1}{2}\sin 2\theta_i \le \frac{\|E\|_2}{\mathrm{gap}\,(\lambda_i, A)}$$

类似的，当 $\mathrm{gap}\left(\tilde{\lambda}_i, A + E\right) > 0$ 时

$$\frac{1}{2}\sin 2\theta_i \le \frac{\|E\|_2}{\mathrm{gap}\left(\tilde{\lambda}_i, A + E\right)}$$

。

- 当 $\theta_i \ll 1$ 时，$\frac{1}{2}\sin 2\theta_i \approx \theta_i \approx \sin\theta_i$；
- 当 $\|E\|_2 \geq \frac{1}{2}\operatorname{gap}(\lambda_i, A)$ 时，定理中给出的上界就失去了实际意义；
- 在该定理中，没有对特征值进行排序；
- 在实际计算中，我们通常所知道的是 $\operatorname{gap}\left(\tilde{\lambda}_i, A+E\right)$。

7.4 Rayleigh 商逼近

定理 设对称矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$。

1. 若 $x \in \mathbb{R}^n$ 是单位向量，$\beta \in \mathbb{R}$，则

$$\min_{1\le i\le n} |\lambda_i - \beta| \le \|Ax - \beta x\|_2 \tag{10}$$

2. 给定非零向量 $x \in \mathbb{R}^n$，当 $\beta = \rho(x)$ 时，$\|Ax - \beta x\|_2$ 达到最小，即

$$\min_{\beta\in\mathbb{R}} \|Ax - \beta x\|_2 = \|Ax - \rho(x)x\|_2 \tag{11}$$

3. 令 $r = Ax - \rho(x)x$，设 λ_i 是离 $\rho(x)$ 最近的特征值，
$\text{gap}' = \min_{j\neq i} |\lambda_j - \rho(x)|$，$\theta$ 是 x 和 q_i 之间的锐角，其中 q_i 是 λ_i 对应的单位特征向量，则

$$\sin\theta \le \frac{\|r\|_2}{\text{gap}'} \quad 且 \quad |\lambda_i - \rho(x)| \le \frac{\|r\|_2^2}{\text{gap}'} \tag{12}$$

由10可知，在幂迭代和反迭代中可以使用残量 $\|Ax - \tilde{\lambda}x\|_2 < tol$ 作为停机准则，这里 $\tilde{\lambda}$ 是迭代过程中计算得到的近似特征值。等式11则解释了为什么用 Rayleigh 商来近似特征值。
不等式12表明 $|\lambda_i - \rho(x)|$ 的值与残量范数 $\|r\|_2$ 的平方成正比，这个结论是 Rayleigh 商迭代局部三次收敛的基础。

7.5 相对扰动分析

这里主要讨论 A 和 X^TAX 的特征值和特征向量之间的扰动关系，其中 X 非奇异且满足 $\left\|X^\top X - I\right\|_2 = \varepsilon$。这是因为在计算特征向量时, 由于舍入误差的原因，最后得到的正交矩阵 Q 会带有误差，从而失去正交性。

定理 (相对 Weyl 定理) 设对称矩阵 A 和 X^TAX 的特征值分别为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ 和 $\tilde{\lambda}_1 \geq \tilde{\lambda}_2 \geq \cdots \geq \tilde{\lambda}_n$，令 $\varepsilon = \left\|X^\top X - I\right\|_2$，则

$$\left|\tilde{\lambda}_i - \lambda_i\right| \leq \varepsilon \left|\lambda_i\right| \text{ 或 } \frac{\left|\tilde{\lambda}_i - \lambda_i\right|}{\left|\lambda_i\right|} \leq \varepsilon \quad (\text{ if } \lambda_i \neq 0)$$

当 X 正交时，$\varepsilon = 0$，故 X^TAX 与 A 有相同的特征值。当 X 几乎正交时，ε 很小，此时 X^TAX 与 A 的特征值几乎相同。

推论　设 G 和 Y^TGX 的奇异值分别为 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n$ 和 $\tilde{\sigma}_1 \geq \tilde{\sigma}_2 \geq \cdots \geq \tilde{\sigma}_n$，令 $\varepsilon = \max\left\{\left\|X^\top X - I\right\|_2, \left\|Y^\top Y - I\right\|_2\right\}$，则

$$|\tilde{\sigma}_i - \sigma_i| \leq \varepsilon\,|\sigma_i| \text{ 或 } \frac{|\tilde{\sigma}_i - \sigma_i|}{|\sigma_i|} \leq \varepsilon \quad (\text{ if } \sigma_i \neq 0)$$

下面给出特征向量的相对扰动性质。

定义　设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$，若 $\lambda_i \neq 0$，则 λ_i 与其余特征值之间的相对间隙 (relative gap) 定义为

$$\operatorname{relgap}(\lambda_i, A) = \min_{j\neq i} \frac{|\lambda_j - \lambda_i|}{|\lambda_i|}$$

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和 $X^\top AX \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 的特征值分解分别为 $A = Q\Lambda Q^\top$ 和 $X^\top AX = \tilde{Q}\tilde{\Lambda}\tilde{Q}^T$，其中 $Q = [q_1, q_2, \ldots, q_n]$ 和 $\tilde{Q} = [\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, \ldots, \tilde{q}_n]$ 均为正交矩阵，$\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n), \tilde{\Lambda} = \operatorname{diag}\left(\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, \ldots, \tilde{\lambda}_n\right)$ 且 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n, \tilde{\lambda}_1 \geq \tilde{\lambda}_2 \geq \cdots \geq \tilde{\lambda}_n$。设 θ_i 表示 q_i 和 $\tilde{q}_i$ 之间的锐角，令 $\varepsilon_1 = \left\|I - X^{-T}X^{-1}\right\|_2, \varepsilon_2 = \|X - I\|_2$，若 $\varepsilon_1 < 1$ 且 $\operatorname{relgap}\left(\tilde{\lambda}_i, X^\top AX\right) > 0$，则

$$\frac{1}{2}\sin 2\theta_i \leq \frac{\varepsilon_1}{1-\varepsilon_1} \cdot \frac{1}{\operatorname{relgap}\left(\tilde{\lambda}_i, X^\top AX\right)} + \varepsilon_2$$