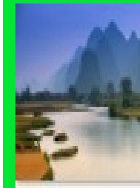
现代数值计算方法

第八章 矩阵特征值问题的计算



第八章 矩阵特征值问题的计算

§8.2 Jacobi 方法

Jacobi 方法用于求解实对称矩阵的全部特征值和对应的特征向量. 其数学原理如下:

(1) n 阶实对称阵的特征值全为实数, 其对应的特征向量线性无关且两两正交.

(2) 相似矩阵具有相同的特征值.

(3) 若 n 阶实矩阵 A 是对称的, 则存在正交矩阵 Q, 使得 $Q^TAQ = D$, 其中 D 是一个对角矩阵, 它的对角元素 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ 就是 A 的特征值, Q 的第 i 列向量就是 λ_i 对应的特征向量.

Jacobi 方法就是基于上述原理, 用一系列正交变换对角化 A, 即逐步消去 A 的非对角元, 从而得到 A 的全部特征值.

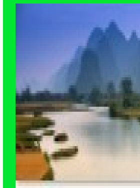
Back
Close

§8.2.1 实对称矩阵的旋转正交相似变换

这里首先介绍一种正交变换, 它是 Jacobi 方法的基本工具.

定义 8.1 设 $1 \le i < j \le n$, 则称矩阵

$$
R_{ij} = \begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & \cos\varphi & & & & \sin\varphi & & & \\
 & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & & & \ddots & & & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & -\sin\varphi & & & & \cos\varphi & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{pmatrix} &
\begin{matrix} \\ \\ \\ i \\ \\ \\ \\ j \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \\
\begin{matrix} \qquad\qquad\qquad i & \qquad\qquad\qquad\qquad j \qquad\qquad\qquad \end{matrix} &
\end{array} \tag{8.10}
$$



为 (i,j) 平面的旋转矩阵, 或 Givens 变换矩阵.

显然, $R=R_{ij}$ 为正交矩阵, 即 $R^TR=I$. 对于向量 $x\in R^n$, 由线性变换 $y=Rx$ 得到的 y 的分量为

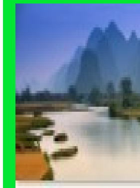
$$\begin{cases} y_i = x_i\cos\varphi + x_j\sin\varphi, \\ y_j = -x_i\sin\varphi + x_j\cos\varphi, \\ y_k = x_k, \quad k\neq i,j, \end{cases} \tag{8.11}$$

即用 R_{ij} 对向量 x 作用, 只改变其第 i,j 两个分量.

由矩阵 $R=R_{ij}$ 确定的正交变换 $y=Rx$ 称为平面旋转变换, 或 Givens 变换. 根据 (8.11) 容易验证, 矩阵 R_{ij} 具有下列基本性质:

定理 8.2 设 $x\in R^n$ 的第 j 个分量 $x_j\neq 0$, $1\leq i<j\leq n$. 若令

$$c=\cos\varphi=\frac{x_i}{\sqrt{x_i^2+x_j^2}}, \quad s=\sin\varphi=\frac{x_j}{\sqrt{x_i^2+x_j^2}}, \tag{8.12}$$



Back
Close

则 $y = R_{ij}x$ 的分量为

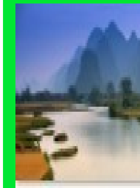
$$\begin{cases} y_i = \sqrt{x_i^2 + x_j^2}, \quad y_j = 0, \\ y_k = x_k, \quad k \neq i, j, \end{cases} \tag{8.13}$$

上述定理表明, 可以用 Givens 变换将向量的某个分量变为零元素. 我们看下面的例子.

例 8.4 设 $x = (-2, 4, -1, 3)^T$, 构造 Givens 变换 R_{24} 使得 $y = R_{24}x$ 的分量 $y_4 = 0$.

解 这里的 $i = 2$, $j = 4$. 按 (8.12), 有

$$c = \cos\varphi = \frac{4}{\sqrt{4^2 + 3^2}} = \frac{4}{5}, \quad s = \sin\varphi = \frac{3}{\sqrt{4^2 + 3^2}} = \frac{3}{5}.$$



由 (8.10) 得

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \frac{4}{5} & & \frac{3}{5} \\ & & 1 & \\ & -\frac{4}{5} & & \frac{4}{5} \end{pmatrix}.$$

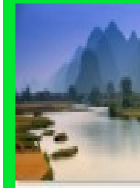
由于 $y_2 = \sqrt{4^2+3^2} = 5$, 故由 (8.13) 得知: $y = R_{24}x = (-2, 5, -1, 0)^T$.

下面我们来讨论 Givens 变换对实对称矩阵的作用. 用旋转矩阵 R_{ij} 对实对称矩阵 $A = (a_{ij})_{n\times n}$ 作正交相似变换, 所得矩阵记为 A_1, 即

$$A_1 = R_{ij}AR_{ij}^T = (a_{ij}^{(1)}).$$

显然

$$A_1^T = (R_{ij}AR_{ij}^T)^T = R_{ij}AR_{ij}^T = A_1,$$



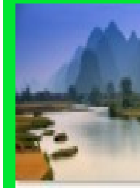
即 A_1 仍为实对称矩阵. 直接计算可得

$$\begin{aligned}
a_{ii}^{(1)} &= a_{ii}\cos^2\varphi + a_{jj}\sin^2\varphi + 2a_{ij}\cos\varphi\sin\varphi,\\
a_{jj}^{(1)} &= a_{ii}\sin^2\varphi + a_{jj}\cos^2\varphi - 2a_{ij}\cos\varphi\sin\varphi,\\
a_{il}^{(1)} &= a_{li}^{(1)} = a_{il}\cos\varphi + a_{jl}\sin\varphi,\quad l\neq i,j,\\
a_{jl}^{(1)} &= a_{lj}^{(1)} = -a_{il}\sin\varphi + a_{jl}\cos\varphi,\quad l\neq i,j,\\
a_{lm}^{(1)} &= a_{ml}^{(1)} = a_{ml},\quad m,l\neq i,j,\\
a_{ij}^{(1)} &= a_{ji}^{(1)} = a_{ij}(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi) - (a_{ii}-a_{jj})\cos\varphi\sin\varphi.
\end{aligned}\tag{8.14}$$

不难看出, A 经过 R_{ij} 的正交相似变换后, A_1 的元素和 A 的元素相比, 只有第 i 行, 第 j 行和第 i 列, 第 j 列元素发生了变化, 而其它元素和 A 是相同的.

由 (8.14) 的最后一个等式可知, 若 $a_{ij}\neq 0$, 则可使适当选取 φ 的值, 使得 $a_{ij}^{(1)} = a_{ji}^{(1)} = 0$. 事实上, 令

$$a_{ij}(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi) - (a_{ii}-a_{jj})\cos\varphi\sin\varphi = 0,$$



Back
Close

解得

$$\cot 2\varphi = \frac{a_{ii} - a_{jj}}{2a_{ij}} = \frac{1 - \tan^2 \varphi}{2 \tan \varphi}, \quad -\frac{\pi}{4} < \varphi \le \frac{\pi}{4}. \tag{8.15}$$

在 Jacobi 方法中, 我们总是按上式选取 φ. 在实际计算时, 为避免使用三角函数. 可令

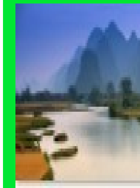
$$t = \tan \varphi, \quad c = \cos \varphi, \quad s = \sin \varphi, \quad d = \frac{a_{ii} - a_{jj}}{2a_{ij}}. \tag{8.16}$$

由 (8.15) 得

$$t^2 + 2dt - 1 = 0. \tag{8.17}$$

方程 (8.17) 有两个根, 取其绝对值最小者为 t, 即

$$t = \begin{cases} -d + \sqrt{d^2 + 1}, & d > 0, \\ 1, & d = 0, \\ -d - \sqrt{d^2 + 1}, & d < 0. \end{cases} \tag{8.18}$$



Back
Close

若记

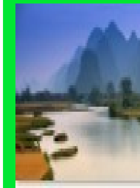
$$c = \cos\varphi = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}, \quad s = \sin\varphi = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}, \tag{8.19}$$

这时, (8.14) 可写为

$$\begin{aligned}
a_{ii}^{(1)} &= a_{ii}c^2 + a_{jj}s^2 + 2csa_{ij}, \\
a_{jj}^{(1)} &= a_{ii}s^2 + a_{jj}c^2 - 2csa_{ij}, \\
a_{il}^{(1)} &= a_{li}^{(1)} = ca_{il} + sa_{jl}, \quad l \neq i, j, \\
a_{jl}^{(1)} &= a_{lj}^{(1)} = -sa_{il} + ca_{jl}, \quad l \neq i, j, \\
a_{lm}^{(1)} &= a_{ml}^{(1)} = a_{ml}, \quad m, l \neq i, j, \\
a_{ij}^{(1)} &= a_{ji}^{(1)} = 0.
\end{aligned} \tag{8.20}$$

§8.2.2 Jacobi 方法

选择 $A_0 = A$ 中一对非零的非对角元素 a_{ij}, a_{ji}, 使用平面旋转矩阵 R_{ij} 作正交相似变换得 A_1, 可使 A_1 的这对非对角元素 $a_{ij}^{(1)} = a_{ji}^{(1)} =$



Back
Close

0; 再选择 A_1 中一对非零的非对角元素作上述旋转正交相似变换得 A_2, 可使 A_2 的这对非对角元素为 0. 如此不断地做旋转正交相似变换, 可产生一个矩阵序列 $A = A_0, A_1, \cdots, A_k, \cdots$. 虽然 A 至多只有 $n(n-1)/2$ 对非零非对角元素, 但不能期望通过 $n(n-1)/2$ 次旋转正交相似变换使其对角化. 因为每次旋转变换虽然能使一对特定的非对角元素化为 0, 但这次变换可能将前面已经化为 0 了的一对非对角元素变成非 0.

但是, 在 Jacobi 方法中的每一步, 比如由 A_{k-1} 变成 A_k, 取其绝对值最大的一对非零非对角元素, 即取

$$\left|a_{i_k j_k}^{(k-1)}\right| = \max_{\substack{1\le i,j\le n \\ i\ne j}} \left|a_{ij}^{(k-1)}\right| \tag{8.21}$$

作旋转相似变换, 这时记旋转矩阵 $R_{ij} = R_{i_k j_k}$. 后面将证明, 这样产生的矩阵序列 $A_0, A_1, \cdots, A_k, \cdots$ 趋向于对角矩阵, 即 Jacobi 方法是收

Back
Close

敛的.

在实际计算中, 可预先取一个小的控制量 $\varepsilon > 0$, 若成立

$$\left|a_{ij}^{(k)}\right| < \varepsilon, \quad i, j =, 1, 2, \cdots, n, \ i \neq j, \tag{8.22}$$

则可视 A_k 为对角矩阵, 从而结束计算. A_k 的对角元素可视为 A 的特征值.

Jacobi 方法也可以求 A 的所有特征向量. 事实上, 由

$$\begin{aligned} A_k &= R_k A_{k-1} R_k^T = R_k R_{k-1} A_{k-2} R_{k-1}^T R_k^T = \cdots \\ &= R_k R_{k-1} \cdots R_1 A R_1^T \cdots R_{k-1}^T R_k^T, \end{aligned}$$

若记

$$Q_k = R_1^T \cdots R_{k-1}^T R_k^T, \tag{8.23}$$

则

$$A_k = Q_k^T A Q_k. \tag{8.24}$$

Back
Close

这里, Q_k 为正交矩阵. 若 A_k 可视为对角矩阵, 其对角元即为 A 的特征值, 其第 i 个对角元 $a_{ii}^{(k)}$ 对应的特征向量就是 Q_k 的第 i 列元素构成的向量. Q_k 的计算可与 A 的旋转相似变换同步进行. 若令 $Q_0 = I$, 则

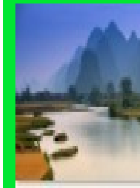
$$Q_k = Q_{k-1} R_k^T. \tag{8.25}$$

若 $R_k = R_{ij}$, 得 Q_k 的计算公式如下:

$$\begin{cases} q_{li}^{(k)} = q_{li}^{(k-1)} c + q_{lj}^{(k-1)} s, \quad l = 1, 2, \cdots, n, \\ q_{lj}^{(k)} = -q_{li}^{(k-1)} s + q_{lj}^{(k-1)} c, \quad l = 1, 2, \cdots, n, \\ q_{km}^{(k)} = q_{km}^{(k-1)}, \quad k, m \neq i, j. \end{cases} \tag{8.26}$$

也就是说, 除了第 i, j 列元素发生变化外, 其它元素不变. 若不需要计算特征向量, 则可省略此步.

根据上讨论, 可得 Jacobi 方法的计算步骤如下:



算法 8.3 (Jacobi 方法)

步 1　输入矩阵 A, $Q=I$, 初始向量 x, 误差限 ε, 最大迭代次数 N, 置 $k:=1$;

步 2　在矩阵中找绝对值最大的非对角元

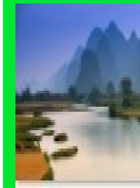
$$\mu=\left|a_{i_r j_r}\right|=\max_{\substack{1\le i,j\le n\\ i\ne j}}|a_{ij}|,$$

置 $i:=i_r,\ j:=j_r$;

步 3　按 (8.16)-(8.20) 式计算 d,t,c,s 的值和矩阵 A_1 的元素 $a_{lm}^{(1)},\ l,m=1,2,\cdots,n$;

步 4　更新 Q 的元素:

$$\begin{cases} q_{li}:=q_{li}c+q_{lj}s, \\ q_{lj}:=-q_{li}s+q_{lj}c, \end{cases} \qquad l=1,2,\cdots,n.$$



步 5 若 $\mu < \varepsilon$, 输出 A_1 的对角元和 Q 的列向量, 停算; 否则, 转步 6;

步 6 若 $k < N$, 置 $k := k + 1$, 转步 2; 否则输出计算失败信息, 停算.

我们给出 Jacobi 方法的 MATLAB 通用程序如下:

```
%majacobieig.m
function [V,D]=majacobieig(A,tol)
%用途: 用Jacobi方法求实对称矩阵A的特征值和特征向量
%格式: [V,D]=majacobieig(A,tol)   A为n阶对称方阵,tol为容
%       许误差,V是特征向量矩阵,D是n阶对角矩阵,其对角
%       元为矩阵A的n个特征值
if nargin<2,tol=1e-3;end
[n,n]=size(A);
```

```
%初始化
D=A; V=eye(n); flag=1;
%计算A的非对角元绝对值最大元素所在的行p和列q
[w1,p]=max(abs(D-diag(diag(D))));
[w2,q]=max(w1); p=p(q);
while(flag==1)
  d=(D(q,q)-D(p,p))/(2*D(p,q));
  %t=sign(d)/(abs(d)+sqrt(1+d^2));
  if(d>0)
     t=-d+sqrt(d^2+1);
  else if(d<0)
      t=-d-sqrt(d^2+1);
    else
```

```
    t=1;
  end
end
c=1/sqrt(t^2+1);  s=c*t;
R=[c s; -s c];
D([p q],:)=R'*D([p q],:);
D(:,[p q])=D(:,[p q])*R;
V(:,[p q])=V(:,[p q])*R;
[w1,p]=max(abs(D-diag(diag(D))));
[w2,q]=max(w1); p=p(q);
if (abs(D(p,q))<tol*sqrt(sum(diag(D).^2)/n))
   flag=0;
end
```

```
end
D=diag(diag(D));
```

例 8.5 利用 Jacobi 方法通用程序 majacobieig.m, 求实对称矩阵 A 的全部特征值和对应的特征向量, 其中

$$A=\begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 5 & 4 \\ 1 & 4 & 7 \end{pmatrix}.$$

解 在 MATLAB 命令窗口执行:

```
>> A=[3 2 1; 2 5 4; 1 4 7];
>> [V,D]=majacobieig(A,1e-5)
V =
     0.7765    -0.5749     0.2580
```

```
    0.3258    0.7167    0.6166
   -0.5394   -0.3947    0.7438
D =
    3.1444         0         0
         0    1.1930         0
         0         0   10.6625
```

§8.2.3 Jacobi 方法的收敛性

我们现在来证明 Jacobi 方法的收敛性. 记实对称矩阵 A 的非对角元素的平方和为

$$S(A)=\sum_{\substack{l,m=1\\ l\neq m}}^{n} a_{lm}^2. \tag{8.27}$$

Back
Close

设 $A_{k+1}=R_{ij}A_kR_{ij}^T$, 则由 (8.20) 不难验证

$$S(A_{k+1})=S(A_k)-2\left[a_{ij}^{(k)}\right]^2. \tag{8.28}$$

即经过这种正交相似变换后, A_{k+1} 的非对角元素平方和减少了 $2[a_{ij}^{(k)}]^2$. 同时, 容易验证

$$\left[a_{ii}^{(k+1)}\right]^2+\left[a_{jj}^{(k+1)}\right]^2=\left[a_{ii}^{(k)}\right]^2+\left[a_{jj}^{(k)}\right]^2+2\left[a_{ij}^{(k)}\right]^2, \tag{8.29}$$

即对角元素的平方和增加了 $2[a_{ij}^{(k)}]^2$. 若在 Jacobi 方法中, 每次旋转正交相似变换使 A_k 的绝对值最大的非对角元素化为 0, 则成立以下定理:

定理 8.3 记实对称矩阵 $A=A_0$, 若在 Jacobi 方法中, 每次旋转正交相似变换使 A_k 的绝对值最大的非对角元素化为 0, 则得到的矩阵序列 $\{A_k\}$ 趋向于对角矩阵.

证 设 A_k 的绝对值最大的非对角元素为 $a_{ij}^{(k)}$, 故有

$$\left[a_{ij}^{(k)}\right]^2 \geq \frac{1}{n(n-1)} S(A_k).$$

用旋转正交相似变换将其化为 0, 得 A_{k+1}, 此时

$$\begin{aligned} S(A_{k+1}) &= S(A_k) - 2\left[a_{ij}^{(k)}\right]^2 \leq S(A_k) - \frac{2}{n(n-1)} S(A_k) \\ &= \left[1 - \frac{2}{n(n-1)}\right] S(A_k) \leq \left[1 - \frac{2}{n(n-1)}\right]^{k+1} S(A). \end{aligned}$$

由于

$$1 - \frac{2}{n(n-1)} < 1,$$

所以

$$\lim_{k\to\infty} S(A_{k+1}) = 0,$$

即 A_{k+1} 趋向于对角矩阵, 故 Jacobi 方法是收敛的. $\square$

作业: P195: 8.5.

Back
Close