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

§8.3 QR 方法

QR 方法用于求一般矩阵的全部特征值, 是目前最有效的方法之一. 本节就实矩阵的情形进行介绍.

§8.3.1 Householder 变换

定义 8.2 设 v 是 $n \times 1$ 向量, 满足 $v^T v = 1$, 令 $H = I - 2vv^T$, 则称 H 为 Householder 矩阵, 又称为初等反射阵.

根据上述定义, 容易看出

$$H^T = (I - 2vv^T)^T = I - 2vv^T = H,$$

Back
Close

且

$$HH^T = HH = (I - 2vv^T)(I - 2vv^T) = I - 4vv^T + 4v(v^Tv)v^T = I,$$

故 H 是对称正交阵.

定理 8.4 设 x, y 是两个不相等的 n 维列向量, 且满足 $\|x\|_2 = \|y\|_2$, 则存在一个 Householder 矩阵 H, 使得 $Hx = y$.

证 令 $v = (x-y)/\|x-y\|_2$, 则有 Householder 矩阵

$$H = I - 2vv^T = I - 2\frac{(x-y)(x^T-y^T)}{\|x-y\|_2^2}.$$

于是

$$Hx = x - 2\frac{(x-y)(x^T-y^T)}{\|x-y\|_2^2}x = x - 2\frac{(x-y)(x^Tx-y^Tx)}{\|x-y\|_2^2},$$

注意到 $\|x-y\|_2^2 = (x-y)^T(x-y) = 2(x^Tx-y^Tx)$, 故 $Hx = x-(x-y) = y$. $\square$

Back
Close

推论 8.1 设 x 是 n 维列向量, $a=\pm\|x\|_2$, 且 $x\neq -ae_1$, 则存在一个 Householder 矩阵

$$H=I-2\frac{uu^T}{\|u\|_2^2}=I-\rho^{-1}uu^T, \tag{8.30}$$

使得

$$Hx=-ae_1,$$

其中 $e_1=(1,0,\cdots,0)^T$, $u=x+ae_1$, $\rho=\|u\|_2^2/2$.

下面讨论推论 8.1 中参数 a 符号的取法. 设 $x=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T\neq 0$, $u=(u_1,u_2,\cdots,u_n)^T$, 则

$$\begin{aligned} u &= x+ae_1=(x_1+a,x_2,\cdots,x_n)^T, \\ \rho &= \frac{1}{2}\|u\|_2^2=\frac{1}{2}\left[(x_1+a)^2+x_2^2+\cdots+x_n^2\right]=a(a+x_1). \end{aligned}$$

Back
Close

由上式可以看出, 如果 a 与 x_1 异号, 则计算 x_1+a 时有效数字可能会损失, 故取 a 与 x_1 有相同的符号, 即取 $a=\operatorname{sgn}(x_1)\|x\|_2$, 其中

$$\operatorname{sgn}(x)=\begin{cases}1, & x>0,\\ 0, & x=0,\\ -1, & x<0\end{cases}$$

下面给出 Householder 矩阵变换的 MATLAB 通用程序.

- Householder 矩阵变换的 MATLAB 程序

```
%househ.m
function H=househ(x)
%用途: 对于向量x,构造Householder变换矩阵H,
%       使得Hx=(*,0,...,0)'
%格式: function H=househ(x)  x为输入列向量,
```


```
%        H返回Householder变换矩阵
n=length(x);
I=diag(ones(1,n));
sn=sign(x(1));
if sn==0  sn=1; end
z=x(2:n);
if norm(z,inf)==0  H=I; return; end
a=sn*norm(x,2); u=x; u(1)=u(1)+a;
rho=a*(a+x(1)); H=I-1.0/rho*u*u';
```

例 8.6 利用 Householder 变换通用程序 househ.m, 将列向量 $x = (2, 1, -3, 4)^T$ 的后三个分量化为零.

解 在 MATLAB 命令窗口执行:

```
>> x=[2 1 -3 4]';
```

Back
Close

```
>> H=househ(x); H*x

ans =

   -5.4772
         0
         0
         0
```

§8.3.2 化一般矩阵为拟上三角矩阵

在用 QR 方法求矩阵特征值时, Householder 矩阵有两个作用: 一是对 A 作正交相似变换, 把 A 化为拟上三角矩阵; 二是对矩阵作正交三角分解. 其中拟上三角阵是指次对角线以下的元素全为零的矩阵,

即

$$\begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ * & * & \cdots & * \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & * & * \end{pmatrix}$$

我们首先讨论把 A 化为拟上三角矩阵. 设 $A_1 = A = (a_{ij}^{(1)})$ 是 n 阶实方阵, 取 $x = (0, a_{21}^{(1)}, \cdots, a_{n1}^{(1)})^T$, 记 $a_1 = a = \mathrm{sgn}(x_2)\|x\|_2$, 则由推论 8.1 构造 Householder 矩阵

$$H_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

使得

$$H_1 x = a_1 e_2.$$

所以 H_1A_1 的第 1 列为

$$H_1\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n1}^{(1)} \end{pmatrix} = H_1x + H_1\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = a_1e_2 + \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} \\ a_1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

因为用 H_1 右乘一个矩阵不改变该矩阵的第 1 列, 于是

$$A_2 = H_1A_1H_1 = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ a_1 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}.$$

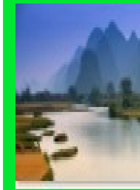
Back
Close

再取 $x=(0,0,a_{32}^{(2)},\cdots,a_{n2}^{(2)})^T$, 记 $a_2=a=\mathrm{sgn}(x_3)\|x\|_2$, 构造 H_2 为

$$H_2=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 0 & * & \cdots & *\\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ 0 & 0 & * & \cdots & *\end{pmatrix},$$

使得

$$H_2x=a_2e_3.$$



所以 H_2A_2 的第 1 列与 A_2 的第 1 列相同, 而 H_2A_2 的第 2 列变为

$$H_2x + H_2 \begin{pmatrix} a_{12}^{(2)} \\ a_{22}^{(2)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = a_2e_3 + \begin{pmatrix} a_{12}^{(2)} \\ a_{22}^{(2)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{12}^{(2)} \\ a_{22}^{(2)} \\ a_2 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

而用 H_2 右乘一个矩阵不改变该矩阵的第 1 列和第 2 列, 于是

$$A_3 = H_2A_2H_2 = \begin{pmatrix} * & * & * & \cdots & * \\ a_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & a_2 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix}.$$

这样下去, 经过 $n-2$ 次变换后, A_1 就化为拟上三角阵 A_{n-1}, 即

$$
\begin{aligned}
A_{n-1} &= H_{n-2}\cdots H_2 H_1 A_1 H_1 H_2 \cdots H_{n-2} \\
&= \begin{pmatrix}
* & * & * & * & \cdots & * \\
a_1 & * & * & * & \cdots & * \\
 & a_2 & * & * & \cdots & * \\
 & & a_3 & * & \cdots & * \\
 & & & \ddots & \ddots & \vdots \\
 & & & & a_{n-1} & *
\end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

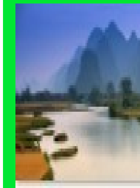
如果 A_1 是对称矩阵, 则 A_{n-1} 仍是对称矩阵, 此时 A_{n-1} 将是对称三对角矩阵:

$$A_{n-1} = \begin{pmatrix} * & a_1 & & & & \\ a_1 & * & a_2 & & & \\ & a_2 & * & a_3 & & \\ & & a_3 & * & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & a_{n-1} \\ & & & & a_{n-1} & * \end{pmatrix}.$$

下面给出将矩阵 A 化为拟上三角矩阵的 MATLAB 通用程序.

- 化矩阵 A 为拟上三角矩阵的 MATLAB 程序

```
%hessen.m
function A=hessen(A)
%用途: 用Householder变换化矩阵A为拟上三角阵.
```



Back
Close

```
%输入: n阶实方阵A
%输出: A的Hessenberg形
%调用函数: househ.m
[n,n]=size(A);
for k=1:(n-2)
    x=A(k+1:n,k);
    H=househ(x);
    A(k+1:n,1:n)=H*A(k+1:n,1:n);
    A(1:n,k+1:n)=A(1:n,k+1:n)*H;
end
```

例 **8.7** 利用通用程序 hessen.m, 将下列矩阵化为拟上三角矩阵:

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

解 在 MATLAB 命令窗口执行:

```
>> A=[1 2 3 4; 3 4 1 2; 4 1 2 3; 2 3 4 1];
>> A=hessen(A)
A =
    1.0000   -4.8281    2.1574    1.0175
   -5.3852    6.2759   -1.7979    0.5586
   -0.0000   -3.0838   -1.4804   -0.9560
   -0.0000   -0.0000   -0.7703    2.2046
```

§8.3.3 矩阵的正交三角分解

设 $A^{(1)} = A = (a_{ij}^{(1)})$ 是 n 阶实方阵, 取 $x = (a_{11}^{(1)}, a_{21}^{(1)}, \cdots, a_{n1}^{(1)})^T$, 记

$$a_1 = a = \operatorname{sgn}(x_1)\|x\|_2,$$

构造 Householder 矩阵 H_1, 则

$$A^{(2)} = H_1 A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_1 & a_{12}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}.$$

再取 $x=(0,a_{22}^{(2)},\cdots,a_{n2}^{(2)})^T$, 记 $a_2=a=\mathrm{sgn}(x_2)\|x\|_2$, 构造 Householder 矩阵 H_2, 则

$$A^{(3)}=H_2A^{(2)}=\begin{pmatrix} a_1 & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & a_2 & a_{23}^{(3)} & \cdots & a_{2n}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} \end{pmatrix}.$$

经过 $n-1$ 次变换后, $A^{(1)}$ 被化为上三角阵 $A^{(n)}$:

$$A^{(n)}=H_{n-1}H_{n-2}\cdots H_1A^{(1)}=\begin{pmatrix} a_1 & * & * & \cdots & * \\ & a_2 & * & \cdots & * \\ & & a_3 & \cdots & * \\ & & & \vdots & \vdots \\ & & & & a_n \end{pmatrix}.$$

记 $Q = H_1 H_2 \cdots H_{n-1}$, $R = A^{(n)}$, 则有

$$A = H_1^{-1} H_2^{-1} \cdots H_{n-1}^{-1} R = H_1 H_2 \cdots H_{n-1} R = QR.$$

因为 Q 是正交矩阵 $H_i\,(i = 1, 2, \cdots, n-1)$ 的乘积, 故也是正交矩阵, R 是上三角矩阵, 这种分解称为正交三角分解, 也叫 QR 分解.

§8.3.4 基本 QR 方法及其通用程序

现在我们来介绍求一般方阵全部特征值的 QR 方法. 令 $A_1 = A$, 对 A_1 作 QR 分解:

$$A_1 = Q_1 R_1,$$

然后令 $A_2 = R_1 Q_1$, 再对 A_2 作 QR 分解:

$$A_2 = Q_2 R_2,$$

18/25
Back
Close

并令 $A_3 = R_2Q_2$, 这样下去就得到一个矩阵序列 $\{A_k\}$, 其产生过程可概述如下:

$$\begin{cases} A_1 = A, \\ A_k = Q_kR_k, \qquad (k = 1, 2, \cdots). \\ A_{k+1} = R_kQ_k \end{cases} \tag{8.31}$$

容易证明, A_{k+1} 与 A_k 相似, 故 $\{A_k\}$ 有相同的特征值.

在一定条件下, $\{A_k\}$ 本质上收敛于上三角矩阵 (或分块上三角阵). 若它们收敛于上三角阵, 则该上三角阵的对角元就是原矩阵 A 的全部特征值; 若收敛于分块上三角阵, 则这些分块矩阵的特征值值也就是 A 的特征值.

由于当 A 为一般的实矩阵时, $\{A_k\}$ 的收敛速度较慢, 故在 QR 方法的实际应用中, 通常先将 A 化为相似的拟上三角阵, 再求特征值以加快收敛速度. 它的计算过程如下:

算法 8.4 (基本 QR 方法)

步 1　输入矩阵 $A \in R^{n\times n}$;

步 2　初始化: A_1 为 A 的拟上三角形矩阵;

步 3　迭代过程: 对于 $k = 1, 2, \cdots$

(1)　$A_k = Q_k R_k \quad (QR\ \text{分解}),$

(2)　$A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k = R_k Q_k \quad (\text{正交相似变换}).$

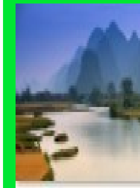
下面给出基本 QR 方法的 MATLAB 通用程序.

- 基本 QR 方法 MATLAB 程序

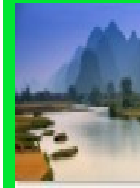
```
%qralg.m
function [iter,D]=qralg(A)
%用途: 用基本QR算法求实方阵的全部特征值.
%输入: n阶实方阵A
```

Back
Close

```
%输出: 迭代次数iter, A全部特征值D
%调用函数: hessen.m, qrtran.m, eig--仅用于1,2矩阵
ep=0.5*1e-4; [n,n]=size(A);
D=zeros(1,n); i=n; m=n; iter=0;  %初始化
A=hessen(A);  %化矩阵A为Hessenbeg形
%用基本QR算法进行迭代
while(n>0)
   if m<=2
      la=eig(A(1:m,1:m)); D(1:m)=la';  break;
   end
   iter=iter+1;
   A=qrtran(m,A); %对A的左上角的m阶对角块作QR变换
   for k=m-1:-1:1
```



```
        if abs(A(k+1,k))<ep
            if m-k<=2
               la=eig(A(k+1:m,k+1:m));
               j=i-m+k+1; D(j:i)=la';
               i=j-1; m=k; break;
             end
         end
     end
end
%qrtran.m
function A=qrtran(m,A)
%功能：对矩阵A的左上角的m阶对角块作QR变换：先用
%Givens变换作QR分解A=QR,再作相似变换A:=Q'AQ=RQ.
```



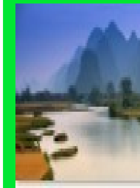
```
%输入: n阶HessenbergA,其中A(m+1,m)=0,m>2.
%输出: 变换后的Hessenberg形矩阵A.
Q=diag(ones(1,m));
for i=1:m-1
   xi=A(i,i);  xk=A(i+1,i);
   if xk~=0
      d=sqrt(xi^2+xk^2); c=xi/d;
      s=xk/d; J=[c, s;-s,c];
      A(i:i+1,i:m)=J*A(i:i+1,i:m);
      Q(1:m,i:i+1)=Q(1:m,i:i+1)*J';
   end
end
A(1:m,1:m)=A(1:m,1:m)*Q;
```

例 8.8 利用通用程序 qralg.m, 求下列矩阵的全部特征值:

$$A=\begin{pmatrix} 3 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 11 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 8 & 9 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ -4 & 2 & 9 & 11 & 13 & 15 & 8 \\ -1 & -2 & -3 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 3 & 2 & 3 & 4 & 13 & 15 & 8 \\ -2 & -2 & -3 & -4 & -5 & -3 & -3 \end{pmatrix}.$$

解 在 MATLAB 命令窗口执行:

```
>> A=[3  2  3  4  5  6  7; 11 1 2  3  4  5 6;
   2  8  9  1  2  3  4; -4 2 9 11 13 15 8;
  -1 -2 -3 -1 -1 -1 -1;  3 2 3  4 13 15 8;
  -2 -2 -3 -4 -5 -3 -3];
```



Back
Close

```
>> [iter,D]=qralg(A)
iter =
      537
D =
   18.4123    11.1805    1.7100-4.2522i   1.7100+4.2522i
   4.4982    -2.2327    -0.2783
```

作业： P195: 8.6; P196: 8.9.