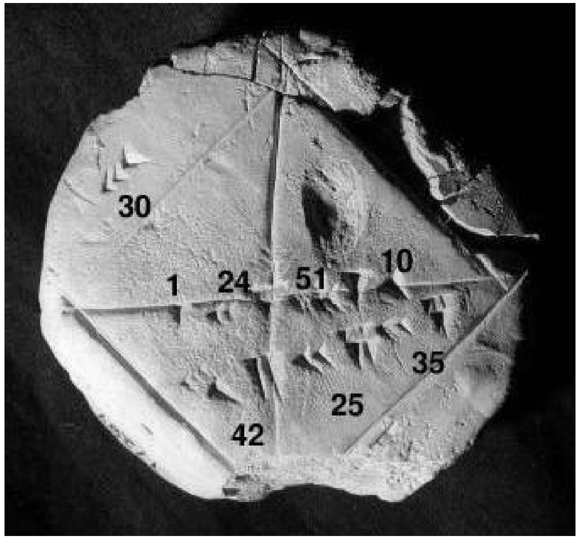
计算方法（B）



童 伟 华　管理科研楼1205室

E-mail: tongwh@ustc.edu.cn

中国科学技术大学　数学科学学院

http://math.ustc.edu.cn/

第七章　计算矩阵的特征值与特征向量

特征值与特征向量

- 在实际工程计算中，经常会遇到特征值和特征向量的计算，如：机械、结构或电磁振动中的固有值问题；物理学中的各种临界值等
- 定义：设有 n 阶矩阵A，若有数 λ 及非零向量v满足方程 $\mathbf{A}\mathbf{v}=\lambda\mathbf{v}$，则称 λ 为A的特征值，v为属于特征值 λ 的特征向量
- 线性代数中特征值和特征向量的计算步骤：
  - 计算矩阵的特征多项式：$\det(\lambda\mathbf{I}-\mathbf{A})=\lambda^n+\cdots+(-1)^n\det(\mathbf{A})$
  - 求解齐次线性方程组的解空间：$(\mathbf{A}-\lambda_i\mathbf{I})\mathbf{v}=\mathbf{0},\ i=1,2,\ldots,n$
- 困难：求解高次多项式的根

特征值与特征向量

- 求解特征值与特征向量的方法按求解方法的特性可以分为：
  - 直接法：可用来计算矩阵的全部特征值和特征向量，一般用于稠密矩阵，计算代价为$O(n^3)$且对矩阵的元素是相对不敏感的（注意：此处的直接法必须作迭代，因为求特征值问题等价于求多项式的根，而后者不可能存在非迭代的方法。如果经验表明，用一个固定的迭代次数收敛（几乎）从不失败，则称该方法是直接的）
  - 迭代法：一般只提供特征值和特征向量的一个子集的近似，一般用于稀疏矩阵或者只适合执行矩阵－向量乘法的矩阵。为了得到几个足够精确的特征值可能需要运行足够长的时间，收敛性强烈的依赖于矩阵的元素
- 求解特征值与特征向量的方法按矩阵的对称性可以分为：
  - 非对称特征值问题：非对称矩阵的特征值问题
  - 对称特征值问题：对称矩阵的特征值问题，不仅内容非常丰富和优美，而且在实际问题中经常遇到

幂法

- 在实际问题中，矩阵按模最大的特征值往往起重要的作用，譬如矩阵的谱半径决定了迭代矩阵是否收敛
- 幂法：计算按模最大特征值及相应特征向量的数值方法
- 要求：矩阵A具有完备的特征向量系，即A有n个线性无关的特征向量。在实际问题中，常遇到的实对称矩阵或具有n个互不相同特征值的矩阵就具有这种性质

幂法

- 设矩阵 A 的特征值和特征向量如下：

  特征值：$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$

  特征向量：$\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_n$

  A是非亏损的，即特征值的几何重数等于代数重数

  幂法可以求 $\lambda_1, \mathbf{v}_1$

- 基本思想：不断利用矩阵向量乘法，分析得到的向量序列，计算出矩阵按模最大特征值及相应特征向量

- 取初值 $\mathbf{x}^{(0)}$，做迭代

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}$$

$$\Rightarrow \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A}^k \mathbf{x}^{(0)},\ \mathbf{x}^{(0)} = \alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 + \cdots + \alpha_n \mathbf{v}_n$$

$$\Rightarrow \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A}^k (\alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 + \cdots + \alpha_n \mathbf{v}_n)$$

$$= \alpha_1 \mathbf{A}^k \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{A}^k \mathbf{v}_2 + \cdots + \alpha_n \mathbf{A}^k \mathbf{v}_n$$

$$= \alpha_1 \lambda_1^k \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \lambda_2^k \mathbf{v}_2 + \cdots + \alpha_n \lambda_n^k \mathbf{v}_n$$

幂法

■ 情形1：若 $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$，则有

$$\mathbf{x}^{(k)} = \lambda_1^{\ k}\left(\alpha_1\mathbf{v}_1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k \alpha_2\mathbf{v}_2 + \cdots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k \alpha_n\mathbf{v}_n\right)$$

$$\alpha_1 \neq 0 \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{x}^{(k)} \approx \lambda_1^{\ k}(\alpha_1\mathbf{v}_1) \\ \mathbf{x}^{(k+1)} \approx \lambda_1^{\ k+1}(\alpha_1\mathbf{v}_1) \end{cases}, \ k \to \infty$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \approx \mathbf{x}^{(k+1)} / \mathbf{x}^{(k)} \\ \mathbf{v}_1 \approx \mathbf{x}^{(k+1)} \end{cases}$$

收敛速度取决于：$\dfrac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}$

幂法

- 情形2：若 $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|, \lambda_1 = -\lambda_2$

$$\mathbf{x}^{(k)} = \lambda_1^{\,k}\left(\alpha_1\mathbf{v}_1 + (-1)^k \alpha_2\mathbf{v}_2 + \cdots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k \alpha_n\mathbf{v}_n\right)$$

$$\alpha_1 \neq 0 \Rightarrow \mathbf{x}^{(k)} \approx \lambda_1^{\,k}\left(\alpha_1\mathbf{v}_1 + (-1)^k \alpha_2\mathbf{v}_2\right),\ k \to \infty$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \mathbf{x}^{(2k+2)} / \mathbf{x}^{(2k)} \approx \lambda_1^{\,2} \\ \mathbf{x}^{(2k+1)} / \mathbf{x}^{(2k-1)} \approx \lambda_1^{\,2} \end{cases}, \quad \begin{cases} \mathbf{v}_1 \approx \mathbf{x}^{(k+1)} + \lambda_1\mathbf{x}^{(k)} \\ \mathbf{v}_2 \approx \mathbf{x}^{(k+1)} - \lambda_1\mathbf{x}^{(k)} \end{cases}$$

- 其它情形……

幂法

- 在幂法中，我们构造的序列

$$\mathbf{x}^{(k)}=\lambda_1^{\,k}\left(\alpha_1\mathbf{v}_1+\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k\alpha_2\mathbf{v}_2+\cdots+\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k\alpha_n\mathbf{v}_n\right)$$

可以看出，当 $k\to+\infty$

$$\mathbf{x}^{(k)}\to\begin{cases}0 & ,\ |\lambda_1|<1\\ \infty & ,\ |\lambda_1|>1\end{cases}$$

- 为避免 $\mathbf{x}^{(k)}$ 分量过大（上溢）或过小（下溢），在实际运算中采用规范运算：

$$\begin{cases}\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{A}\mathbf{y}^{(k)}\\ \mathbf{y}^{(k+1)}=\mathbf{x}^{(k+1)}/\left\|\mathbf{x}^{(k+1)}\right\|_\infty\end{cases}$$

幂法

- 不难发现：

$$\begin{cases} \mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{A}\mathbf{y}^{(k-1)} / \left\|\mathbf{x}^{(k)}\right\|_\infty = \cdots = \mathbf{A}^k\mathbf{y}^{(0)} / \left(\left\|\mathbf{x}^{(k)}\right\|_\infty \cdots \left\|\mathbf{x}^{(1)}\right\|_\infty\right) \\ \left\|\mathbf{y}^{(k)}\right\|_\infty = 1 \end{cases}$$

- 从而有

$$\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{A}^k\mathbf{y}^{(0)} / \left\|\mathbf{A}^k\mathbf{y}^{(0)}\right\|_\infty$$

$$\mathbf{y}^{(k)} = \frac{\lambda_1^k \left(\alpha_1\mathbf{v}_1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k \alpha_2\mathbf{v}_2 + \cdots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k \alpha_n\mathbf{v}_n\right)}{\left|\lambda_1\right|^k \cdot \left\|\left(\alpha_1\mathbf{v}_1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k \alpha_2\mathbf{v}_2 + \cdots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k \alpha_n\mathbf{v}_n\right)\right\|_\infty}$$

幂法

■ 情形1：若 $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$，则有

$$\mathbf{y}^{(k)} \approx \frac{\lambda_1^{\ k}(\alpha_1\mathbf{v}_1)}{|\lambda_1^{\ k}| \cdot \|(\alpha_1\mathbf{v}_1)\|_\infty} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{y}^{(k)} \to \begin{cases} \pm\dfrac{\alpha_1\mathbf{v}_1}{\|\alpha_1\mathbf{v}_1\|_\infty}, & \lambda_1 < 0 \\[2ex] \dfrac{\alpha_1\mathbf{v}_1}{\|\alpha_1\mathbf{v}_1\|_\infty}, & \lambda_1 > 0 \end{cases}$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A}\mathbf{y}^{(k)} = \lambda_1\mathbf{y}^{(k)}$$

$$\|\mathbf{x}^{(k+1)}\|_\infty = |\lambda_1\mathbf{y}^{(k)}|_\infty \approx |\lambda_1|$$

A) 若 $\lambda_1 > 0$，则 $\{\mathbf{y}^{(k)}\}$ 收敛，$\lambda_1 \approx \|\mathbf{x}^{(k+1)}\|_\infty$，$\mathbf{v}_1 \approx \mathbf{y}^{(k)}$

B) 若 $\lambda_1 < 0$，则 $\{\mathbf{y}^{(2k)}\},\{\mathbf{y}^{(2k+1)}\}$ 分别收敛于互为反号的向量，$\lambda_1 \approx -\|\mathbf{x}^{(k+1)}\|_\infty$，$\mathbf{v}_1 \approx \mathbf{y}^{(k)}$

幂法

- 情形2：若 $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3| \ge \cdots \ge |\lambda_n|, \lambda_1 = -\lambda_2$，则有

$$\mathbf{y}^{(k)} = \frac{\lambda_1^{\,k}\left(\alpha_1\mathbf{v}_1 + (-1)^k\alpha_2\mathbf{v}_2 + \cdots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k\alpha_n\mathbf{v}_n\right)}{|\lambda_1|^k\cdot\left\|\left(\alpha_1\mathbf{v}_1 + (-1)^k\alpha_2\mathbf{v}_2 + \cdots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k\alpha_n\mathbf{v}_n\right)\right\|_\infty}$$

$\{\mathbf{y}^{(2k)}\},\{\mathbf{y}^{(2k-1)}\}$ 分别收敛于两个向量，且不是互为反号

令 $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}$，则 $\lambda_1 \approx \sqrt{\mathbf{x}^{(k+1)} / \mathbf{y}^{(k-1)}}$，$\lambda_2 = -\lambda_1$

$$\begin{cases} \mathbf{v}_1 \approx \mathbf{x}^{(k+1)} + \lambda_1\mathbf{x}^{(k)} \\ \mathbf{v}_2 \approx \mathbf{x}^{(k+1)} - \lambda_1\mathbf{x}^{(k)} \end{cases}$$

- 其它情形……

幂法

- （Rayleigh商）设 $\mathbf{A} \in R^{n\times n}$，对 $\mathbf{x} \in R^n$ 定义

$$R(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^T\mathbf{x}}$$

称为矩阵 A 在 x 的Rayleigh商

- 性质：对于给定的 x，最小二乘问题

$$\min_{\alpha\in\mathbb{R}} \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \alpha\mathbf{x}\|_2$$

有显示解，即 $\alpha = R(\mathbf{x})$

当X趋于但未必等于特征向量时，
$R(\mathbf{x})$就是一个自然的特征值估计

- 不难发现 $\nabla R(\mathbf{x}) = 2(\mathbf{A}\mathbf{x} - R(\mathbf{x})\mathbf{x}) / \mathbf{x}^T\mathbf{x}$，因此：若 x 是A的特征向量，那么 $R(\mathbf{x})$的梯度为零向量；反之，若 $\nabla R(\mathbf{x}) = 0$ 且 $\mathbf{x} \neq 0$，则 x 是特征向量，$R(\mathbf{x})$是相对应的特征值

- 利用函数 $R(\mathbf{x})$的光滑性，可以得出一个重要结论：

$$R(\mathbf{x}) - R(\mathbf{q}) = O(\|\mathbf{x} - \mathbf{q}\|^2), \quad \mathbf{x} \to \mathbf{q}$$

幂法

■ 幂法迭代算法

Algorithm 18 Power Iteration Algorithm

Input:

n, $\mathbf{A}$, $\mathbf{x}$, M, ε

$\mathbf{v} \leftarrow \mathbf{x}/||\mathbf{x}||$;

$\mu \leftarrow \mathbf{v}^T\mathbf{A}\mathbf{v}$;

for $k = 1$ to M **do**

  $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{v}$;

  $\mathbf{u} \leftarrow \mathbf{x}/||\mathbf{x}||$;

  $\lambda \leftarrow \mathbf{u}^T\mathbf{A}\mathbf{u}$;

  if $|\lambda - \mu| < \varepsilon$ **or** $||\mathbf{u} - \mathbf{v}|| < \varepsilon$ **then**

    $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{u}$;

    break;

  else

    $\mathbf{v} \leftarrow \mathbf{u}$;

    $\mu \leftarrow \lambda$;

  end if

end for

Output:

λ, $\mathbf{x}$

反幂法

- 基本思想：计算按模最小特征值及相应特征向量的数值方法
- 矩阵A与$\mathbf{A}^{-1}$特征值之间的关系：

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \Rightarrow \mathbf{A}^{-1}\mathbf{v} = \frac{1}{\lambda}\mathbf{v}$$

$$\mathbf{A}: |\lambda_1| \ge |\lambda_2| \ge \cdots \ge |\lambda_n| > 0$$

$$\mathbf{A}^{-1}: |\mu_1| \le |\mu_2| \le \cdots \le |\mu_n|$$

- 反幂法迭代：

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}^{(k)} \\ \mathbf{y}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k+1)} / \left\|\mathbf{x}^{(k+1)}\right\|_\infty \end{cases}$$

- 为避免求 $\mathbf{A}^{-1}$，可用分解法求解线性方程组：

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}^{(k)} \Leftrightarrow \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{y}^{(k)}$$

反幂法

- 设$\tilde{\lambda}_i$是矩阵A特征值λ_i的近似，带原点位移$\tilde{\lambda}_i$的反幂法迭代进行如下：

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{(k+1)} = \left(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}_i \mathbf{I}\right)^{-1} \mathbf{y}^{(k)} \\ \mathbf{y}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k+1)} / \left\| \mathbf{x}^{(k+1)} \right\|_\infty \end{cases}$$

- 若$|\lambda_i - \tilde{\lambda}_i| < |\lambda_j - \tilde{\lambda}_i|, \forall j \neq i$，则迭代收敛
- 用途：用于求矩阵A的最接近给定初值$\tilde{\lambda}_i$的特征值λ_i及相应的特征向量

反幂法

■ 带原点位移的反幂法迭代算法

Algorithm 19 Shifted Inverse Power Iteration Algorithm

Input:

n, $\mathbf{A}$, $\mathbf{x}$, s, M, ε

$\mathbf{v} \leftarrow \mathbf{x}/||\mathbf{x}||$;
$\mathbf{x} \leftarrow (\mathbf{A} - s\mathbf{I})^{-1}\mathbf{v}$;
$\mu \leftarrow \mathbf{v}^T\mathbf{x}$;
for $k = 1$ to M **do**
    $\mathbf{u} \leftarrow \mathbf{x}/||\mathbf{x}||$;
    $\mathbf{x} \leftarrow (\mathbf{A} - s\mathbf{I})^{-1}\mathbf{u}$;
    $\lambda \leftarrow \mathbf{u}^T\mathbf{x}$;
    if $|\lambda - \mu| < \varepsilon$ **or** $||\mathbf{u} - \mathbf{v}|| < \varepsilon$ **then**
        $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{u}$;
        $\lambda = 1/\lambda + s$;
        break;
    else
        $\mathbf{v} \leftarrow \mathbf{u}$;
        $\mu \leftarrow \lambda$;
    end if
end for

Output:

λ, $\mathbf{x}$

实对称矩阵的Jacobi方法

- 特征值与特征向量的计算：要充分考虑矩阵的特性，譬如对称性、正定性、稀疏性等，来选用合适的算法
- 定理：若矩阵 $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$是对称的，则存在正交阵 $\mathbf{Q}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 使得

$$
\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{Q}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n\end{pmatrix},\ \lambda_i\in\mathbb{R},\ i=1,2,\ldots,n
$$

- 基本思想：对于一般的矩阵，不可能直接找到 $\mathbf{Q}$，而是构造一系列特殊形式的正交阵对 $\mathbf{A}$ 进行正交变换，使得对角元比重逐渐增加，非对角元变小。

实对称矩阵的Jacobi方法

- Givens旋转变换：

$$
\mathbf{Q}(p,q,\theta)=
\begin{array}{c}
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & \\
 & & \cos\theta & & \sin\theta & & \\
 & & & \ddots & & & \\
 & & -\sin\theta & & \cos\theta & & \\
 & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & 1
\end{pmatrix} \\
\begin{array}{ccccccc}
 & & \uparrow & & \uparrow & & \\
 & & p\text{列} & & q\text{列} & &
\end{array}
\end{array}
$$

实对称矩阵的Jacobi方法

- 设矩阵 $\mathbf{A}=(a_{ij})_{n\times n}$，则 $\mathbf{B}=\mathbf{Q}^T(p,q,\theta)\mathbf{A}\mathbf{Q}(p,q,\theta)=(b_{ij})_{n\times n}$

$$\begin{cases} b_{ip}=b_{pi}=a_{pi}\cos\theta-a_{qi}\sin\theta, i\neq p,q \\ b_{iq}=b_{qi}=a_{pi}\sin\theta+a_{qi}\cos\theta, i\neq p,q \\ b_{pp}=a_{pp}\cos^2\theta+a_{qq}\sin^2\theta-a_{pq}\sin 2\theta \\ b_{qq}=a_{pp}\sin^2\theta+a_{qq}\cos^2\theta+a_{pq}\sin 2\theta \\ b_{pq}=b_{qp}=a_{pq}\cos 2\theta+\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\sin 2\theta \end{cases}$$

- 目标：

$$b_{pq}=b_{qp}=a_{pq}\cos 2\theta+\frac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\sin 2\theta=0$$

实对称矩阵的Jacobi方法

- 若记

$$s = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}}, \quad t = \tan\theta$$

- 则有

$$t = \begin{cases} t^2 + 2ts - 1 = 0\text{按模的较小根,} & s \neq 0 \\ 1, & s = 0 \end{cases}$$

实对称矩阵的Jacobi方法

- 若记

$$\begin{cases} \cos\theta = \dfrac{1}{\sqrt{1+t^2}} \equiv c \\ \sin\theta = \dfrac{t}{\sqrt{1+t^2}} \equiv d \end{cases}$$

- 则有

$$\begin{cases} b_{ip} = b_{pi} = ca_{pi} - da_{qi}, i \neq p, q \\ b_{iq} = b_{qi} = da_{pi} + ca_{qi}, i \neq p, q \\ b_{pp} = a_{pp} - ta_{pq} \\ b_{qq} = a_{qq} + ta_{pq} \\ b_{pq} = b_{qp} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \sum\limits_{i \neq j} b_{ij}^2 = \sum\limits_{i \neq j} a_{ij}^2 - 2a_{pq}^2 \\ \sum\limits_{i=1}^{n} b_{ii}^2 = \sum\limits_{i=1}^{n} a_{ii}^2 + 2a_{pq}^2 \end{cases}$$

实对称矩阵的Jacobi方法

- Jacobi方法：取 p,q 使得 $|a_{pq}|=\max\limits_{i\neq j}|a_{ij}|$，连续实施Givens变换，即

$$\mathbf{A}^{(k+1)}=\mathbf{Q}^{T}(p,q,\theta)\mathbf{A}^{(k)}\mathbf{Q}(p,q,\theta)$$

- 定理：若对称矩阵 $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，则

$$\mathbf{A}^{(k+1)}\rightarrow diag\{\lambda_1,\cdots,\lambda_n\}$$

- 优点：特征值计算结果精度一般比较高，特征向量的正交性也较好，适合于并行计算
- 缺点：当计算稀疏矩阵的特征值时，Givens变换后不能保持原矩阵稀疏的性质
- 用途：计算对称稠密矩阵的全部特征值及相应的特征向量

实对称矩阵的Jacobi方法

■ 实对称矩阵的Jacobi 迭代算法

Algorithm 20 Jacobi Algorithm

```
Input:
    n, A, M, ε
V ← I_n;
δ ← ε · ||A||_F;
for k = 1 to M do
    Choose (p, q) such that |a_pq| = max_{i≠j} |a_ij|;
    if a_pq ≠ 0 then
        s ← (a_qq − a_pp)/(2 ∗ a_pq);
        if s ≥ 0 then
            t ← 1/(s + √(1 + s^2));
        else
            t ← 1/(s − √(1 + s^2));
        end if
        c ← 1/√(1 + t^2);
        d ← t ∗ c;
    else
        c ← 1;
        d ← 0;
    end if
    A ← Q(p, q, θ)^T A Q(p, q, θ);
    V ← V Q(p, q, θ);
    off(A) ← ||A − diag(A)||_F
    if off(A) < δ then
        break;
    end if
end for
Output:
    V, D
```

QR方法

- Householder矩阵：若 $\mathbf{v}\in\mathbb{R}^n, \|\mathbf{v}\|=1$，则矩阵

$$\mathbf{H}=\mathbf{I}-2\mathbf{v}\mathbf{v}^T$$

称为 Householder矩阵，且满足以下的性质：

（1）$\det(\mathbf{H})=-1$ ；

（2）$\mathbf{H}$ 为对称正交矩阵；

（3）若 $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbb{R}^n, \|\mathbf{x}\|=\|\mathbf{y}\|$，记 $\mathbf{v}=\dfrac{\mathbf{y}-\mathbf{x}}{\|\mathbf{y}-\mathbf{x}\|}, \mathbf{H}=\mathbf{I}-2\mathbf{v}\mathbf{v}^T,$ 则 $\mathbf{H}\mathbf{x}=\mathbf{y}$

- Householder变换：镜像变换的推广

QR方法

- （QR分解定理）：设 $A\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是列满秩的，则矩阵A能分解为 $A=QR$ 的形式，其中 $Q\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是酉矩阵，$R\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是非奇异上三角阵

  推论：设 $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是列满秩的，则矩阵A能唯一分解为 $A=QR$ 的形式，其中 $Q\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是正交阵，$R\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 是非奇异上三角阵
- 对于非满秩的矩阵或一般形式的 $m\times n$ 阶矩阵，有类似的结论
- QR方法：一种求解完全特征值问题的算法，属于变换方法，与Gram-Schmidt正交化过程密切相关

QR方法

- Householder变换：设 $0 \neq \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$，如何构造 $\mathbf{v}$ 及 $\mathbf{H}$ 使得 $\mathbf{Hx} = \alpha \mathbf{e}_1$？
- 取 $\mathbf{v} = \dfrac{\mathbf{x} - \|\mathbf{x}\|_2 \mathbf{e}_1}{\|\mathbf{x} - \|\mathbf{x}\|_2 \mathbf{e}_1\|_2}$，$\mathbf{H} = \mathbf{I} - 2\mathbf{v}\mathbf{v}^T$，则有 $\mathbf{Hx} = \|\mathbf{x}\|_2 \mathbf{e}_1 = \alpha \mathbf{e}_1$
- 计算QR分解的算法：设 $\mathbf{A} = [\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n]$

  第一步：取 $\mathbf{v}_1 = (\boldsymbol{\alpha}_1 - \alpha_1 \mathbf{e}_1)/\rho_1$，$\mathbf{Q}_1 = \mathbf{I} - 2\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1^T$，则

  $\mathbf{Q}_1\mathbf{A} = [\alpha_1 \mathbf{e}_1, \boldsymbol{\alpha}_2^{(2)}, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n^{(2)}]$，$\alpha_1 = -sign(a_{11}) \cdot \|\boldsymbol{\alpha}_1\|_2$，$\rho_1 = \|\boldsymbol{\alpha}_1 - \alpha_1 \mathbf{e}_1\|_2$

  第 k 步：记 $\boldsymbol{\alpha}_k^{(k)} = [a_{1k}^{(k)}, \ldots, a_{k-1,k}^{(k)}, \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_k^{(k)T}]^T$，取

$$\mathbf{v}_k = (\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_k^{(k)} - \alpha_k \mathbf{e}_1^{(k)})/\rho_k, \quad \mathbf{Q}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \\ & \mathbf{I} - 2\mathbf{v}_k\mathbf{v}_k^T \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Q}_k \cdots \mathbf{Q}_1 \mathbf{A} = [\alpha_1 \mathbf{e}_1, a_{12}^{(2)} \mathbf{e}_1 + \alpha_2 \mathbf{e}_2, \ldots, \sum_{i=1}^{k-1} a_{ik}^{(k)} \mathbf{e}_i + \alpha_k \mathbf{e}_k, \boldsymbol{\alpha}_{k+1}^{(k+1)}, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n^{(k+1)}]$$

QR方法

- 不断利用Householder变换：

$$\mathbf{Q}_{n-1}\cdots\mathbf{Q}_1\mathbf{A}=\begin{bmatrix}\alpha_1 & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(3)} & \cdots & a_{1n}^{(n)}\\ & \alpha_2 & a_{23}^{(3)} & \cdots & a_{2n}^{(n)}\\ & & \alpha_3 & \cdots & a_{3n}^{(n)}\\ & & & \ddots & \vdots\\ & & & & \alpha_n\end{bmatrix}=\mathbf{R}$$

$$\Rightarrow \mathbf{A}=(\mathbf{Q}_{n-1}\cdots\mathbf{Q}_1)^{-1}\mathbf{R}=(\mathbf{Q}_1^{-1}\cdots\mathbf{Q}_{n-1}^{-1})\mathbf{R}=(\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_{n-1})\mathbf{R}=\mathbf{QR}$$

- 算法时间复杂度：$O(4n^3/3)$

QR方法

- 设矩阵A的特征值满足：$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$，作以下相似正交序列：

$$\begin{cases} \mathbf{A}_k = \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_k \\ \mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{R}_k \mathbf{Q}_k \end{cases}$$

则当$k \to \infty$时，有

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k)} \to 0, \ 1 \le j < i \le n \\ a_{ii}^{(k)} \to \lambda_i, \ i = 1, 2, \ldots, n \end{cases}$$

收敛于上三角矩阵，对角线元素即为矩阵的特征值

- 有以下关系：

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{Q}_k^{-1} \mathbf{A}_k \mathbf{Q}_k = \mathbf{Q}_k^{-1} \cdots \mathbf{Q}_1^{-1} \mathbf{A} \mathbf{Q}_1 \cdots \mathbf{Q}_k$$

$$\tilde{\mathbf{Q}}_k = \mathbf{Q}_1 \cdots \mathbf{Q}_k, \ \tilde{\mathbf{R}}_k = \mathbf{R}_k \cdots \mathbf{R}_1$$

$$\Rightarrow \mathbf{A}^{k+1} = \tilde{\mathbf{Q}}_{k+1} \tilde{\mathbf{R}}_{k+1}$$

QR方法

- QR方法的收敛性证明较困难，参见《Matrix Computations》，4^{th} ed., p368 – p372.
- QR方法的改进
  - 带位移的QR算法
  - 实矩阵的双重步QR算法
- 广义特征值问题
  - QZ算法（QR算法的推广形式）

特征值与特征向量

- 三对角阵
  - 二分法
  - Sturm序列方法
  - 分而治之方法
- 高阶稀疏矩阵
  - Lanczos方法
  - Arnoldi with restarting
  - Implicit restarting
  - Jacobi-Davidson方法
- SVD分解
  - Jacobi方法
  - QR方法
  - Golub-Kahan方法