科学与工程计算方法 **Winter 2017**

Lecture 9: 矩阵特征值问题的数值解法

Lecturer: Zhitao Liu *Scribes: Yusu Pan*

9.1 引言

9.1.1 问题的背景和内容概要

- 特征方程, 特征值, 特征向量
- 本章介绍两类实用迭代法–幂法 (及其变形) 和 QR 算法. 前者主要用于求部分特征值和特征向量, 后者用于求全部特征值和特征向量.

9.1.2 特征值的扰动和条件数

定理 9.1.1. *(扰动后的矩阵特征值误差)*

- 矩阵特征值的条件数
- 病态矩阵

9.2 幂法及其变形

9.2.1 幂法和外推加速

- 主特征值 (模最大), 主特征向量
- 幂法的原始形式

$$\begin{aligned} v_k &= Av_{k-1} = A^k v_0 \\ &\approx \lambda^k \alpha_1 x_1, \frac{(v_{k+1})_l}{(v_k)_l} \approx \lambda_1 \end{aligned} \tag{9.1}$$

算法 9.2.1. *(幂法)*

- 取 $u_0 = [1, \ldots, 1]^T$
- 迭代过程

  1. $v_k = Au_{k-1}$
  2. $m_k = \max(v_k)$
  3. $u_k = v_k / m_k$
  4. 当 $\frac{|m_k - m_{k-1}|}{1+|m_k|} < \epsilon$ 时终止, u_k 为 x_1, m_k 为 λ

定理 9.2.1. *(幂法的收敛性 1)*

例 9.2.1. *(用幂法求主特征值和主特征向量)*

定理 9.2.2. *(幂法的收敛性 2)*

算法 9.2.2. *(外推加速的幂法/Aitken 外推法)*

- 取 $u_0 = [1, \ldots, 1]^T$
- 迭代过程

  1. $v_k = Au_{k-1}$
  2. $m_k = \max(v_k)$

$$\tilde{m}_k = m_{k-2} - \frac{(m_{k-1} - m_{k-2})^2}{m_k - 2m_{k-1} + m_{k-2}} \tag{9.2}$$

  3. $u_k = v_k / m_k$
  4. 当 $\frac{|\tilde{m}_k - \tilde{m}_{k-1}|}{1+|\tilde{m}_k|} < \epsilon$ 时终止, 并计算 $\tilde{u}_k$

$$(\tilde{u}_k)_j = \begin{cases} 1, & (u_k)_j = 1 \\ (u_{k-2})_j - \frac{[(u_{k-1})_j - (u_{k-2})_j]^2}{(u_k)_j - 2(u_{k-1})_j + (u_{k-2})_j}, & (u_k)_j \neq 1 \end{cases} \tag{9.3}$$

9.2.2 反幂法和原点位移

- 反幂法: 求 A 的最小特征值及特征向量, 只需对 A^{-1} 使用幂法

$$\begin{cases} v_k = A^{-1} u_{k-1} \\ m_k = \max(v_k) \\ u_k = v_k / m_k \end{cases} \tag{9.4}$$

- 原点位移的反幂法: 求 A 距离点 s 严格最近的特征值

$$\begin{cases} v_k = (A - sI)^{-1} u_{k-1} \\ m_k = \max(v_k) \\ u_k = v_k / m_k \end{cases} \tag{9.5}$$

- 动态原点位移: 使用原点位移的反幂法对幂法加速

例 9.2.2. *(用反幂法和原点位移的反幂法求解)*

例 9.2.3. *(动态原点位移)*

9.2.3 对称矩阵的修正幂法

算法 9.2.3. *(实对称矩阵的修正幂法)*

- 取 $u_0 = \frac{1}{\sqrt{n}}[1, \ldots, 1]^T$
- 迭代过程

1. $v_k = Au_{k-1}$
2. $m_k = v_k^T u_{k-1}$
3. $u_k = v_k / \|v_k\|_2$
4. 当 $\frac{|m_k - m_{k-1}|}{1+|m_k|} < \epsilon$ 时终止

例 9.2.4. *(幂法与修正幂法的对比)*

9.3 矩阵的两种正交变换

9.3.1 平面旋转变换和镜面反射变换

定义 9.3.1. *(平面旋转变换/Givens 变换矩阵)*

定理 9.3.1. *(平面旋转矩阵的性质)*

例 9.3.1. *(构造平面旋转矩阵)*

定义 9.3.2. *(初等镜面反射矩阵/Householder 变换矩阵)*

定理 9.3.2. *(构造镜面反射矩阵 1)*

引理 9.3.1. *(构造镜面反射矩阵 2)*

例 9.3.2. *(构造镜面反射矩阵)*

引理 9.3.2. *(构造镜面反射矩阵 3)*

矩阵的收缩方法

9.3.2 化矩阵为 Hessenberg 形

定义 9.3.3. *(Hessenberg 矩阵/可约与不可约)*

定理 9.3.3. 任何实方阵都可以通过正交相似变化化为 *Henssenberg* 形

$$B = Q^T A Q \tag{9.6}$$

9.3.3 矩阵的 QR 分解

定理 9.3.4. *(QR 分解定理 ★)*

$$\begin{aligned} A &= QR \\ R = A_n, Q &= H_1 H_2 \cdots H_{n-1} \end{aligned} \tag{9.7}$$

9.4 QR 算法

9.4.1 QR 算法及其收敛性

定理 9.4.1. *(Schur 分块上三角)*

算法 9.4.1. *(基本 QR 算法)*

- 初始化: A_1 为 A 的 *Hessenberg* 形
- QR 变换
  1. $A_k = Q_k R_k$ (QR 分解)
  2. $A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k = R_k Q_k$ (正交相似变换)

定理 9.4.2. *(基本 QR 算法的性质)*

引理 9.4.1.

定理 9.4.3. *(QR 算法的收敛性)*

定理 9.4.4. *(QR 算法求 A 的全部特征值)*

9.4.2 QR 算法的改善

- 划分和收缩
- 原点位移

  算法 9.4.2. *(原点位移的 QR 变换)*

9.4.3 双步隐式 QR 算法 *

算法 9.4.3. *(双步隐式 QR 变换)*

算法 9.4.4. *(双步隐式 QR 算法)*