对称特征值问题的计算方法

邓建松

对称矩阵的特征值问题

- 对称矩阵的特征值问题具有许多良好的性质和十分丰富又完美的数学理论

对称矩阵的特征值问题

- 对称矩阵的特征值问题具有许多良好的性质和十分丰富又完美的数学理论
- 关于它的计算方法和相应的理论成为矩阵计算中发展得最为完善的一部分

对称矩阵的特征值问题

- 对称矩阵的特征值问题具有许多良好的性质和十分丰富又完美的数学理论
- 关于它的计算方法和相应的理论成为矩阵计算中发展得最为完善的一部分
- 本章介绍其中几个最基本的数值方法

对称矩阵特征值的性质

- 实对称矩阵的特征值均为实数

对称矩阵特征值的性质

- 实对称矩阵的特征值均为实数
- 其特征向量可以构成$\mathbb{R}^n$的一组标准正交基

对称矩阵特征值的性质

- 实对称矩阵的特征值均为实数
- 其特征向量可以构成$\mathbb{R}^n$的一组标准正交基

定理

若$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$是对称的，则存在正交矩阵$Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$使得

$$Q^T AQ = \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$$

极小极大定理

定理

设$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$是对称的，并假定$A$的特征值为$\lambda_1 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n$，则有

$$\lambda_i = \max_{\mathcal{X}\in\mathcal{G}_i^n} \min_{0\neq u\in\mathcal{X}} \frac{u^TAu}{u^Tu} = \min_{\mathcal{X}\in\mathcal{G}_{n-i+1}^n} \max_{0\neq u\in\mathcal{X}} \frac{u^TAu}{u^Tu}$$

其中$\mathcal{G}_k^n$表示$\mathbb{R}^n$中所有k维子空间的全体

特征值的敏感性：Weyl定理

定理

设n阶对称矩阵A和B的特征值分别为

$$\lambda_1 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \text{和} \mu_1 \geqslant \cdots \geqslant \mu_n$$

则有

$$|\lambda_i - \mu_i| \leqslant \|A - B\|_2, \quad i = 1, \ldots, n$$

特征向量的敏感性

定理

设A和$A+E$是两个n阶实对称矩阵，并假设q_1是A的一个单位特征向量，$Q=(q_1,Q_2)$是n阶正交矩阵，矩阵分块如下：

$$Q^TAQ=\begin{pmatrix}\lambda & 0\\ 0 & D_2\end{pmatrix},\quad Q^TEQ=\begin{pmatrix}\varepsilon & e^T\\ e & E_{22}\end{pmatrix}$$

若$d=\min\limits_{\mu\in\lambda(D_2)}|\lambda-\mu|>0$, $\|E\|_2\leqslant\dfrac{1}{4}d$, 则存在$A+E$的一个单位特征向量$\tilde{q}_1$使得

$$\sin\theta=\sqrt{1-|q_1^T\tilde{q}_1|^2}\leqslant\frac{4}{d}\|e\|_2\leqslant\frac{4}{d}\|E\|_2$$

其中θ是向量q_1和$\tilde{q}_1$之间所夹的锐角，即$\theta=\arccos|q_1^T\tilde{q}_1|$

SVD分解定理

- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 则存在正交矩阵$U \in \mathbb{R}^{m\times m}$和$V \in \mathbb{R}^{n\times n}$使得

$$U^T AV = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

其中$\Sigma_r = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$, $\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0$

SVD分解定理

- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 则存在正交矩阵$U \in \mathbb{R}^{m\times m}$和$V \in \mathbb{R}^{n\times n}$使得
$$U^T AV = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
其中$\Sigma_r = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$, $\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0$
- 对于上述分解，我们称
$$\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n = 0$$
为A的奇异值；U和V的列向量分别称为A的左/右奇异向量

奇异值的稳定性

定理

设$A, B \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 并假定它们的奇异值分别为

$$\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_n \text{和} \tau_1 \geqslant \cdots \geqslant \tau_n$$

则有

$$|\sigma_i - \tau_i| \leqslant \|A - B\|_2, \quad i = 1, \ldots, n$$

对称QR方法

- 对称QR方法就是求解对称特征值问题的QR方法

对称QR方法

- 对称QR方法就是求解对称特征值问题的QR方法
- 它是将QR方法应用于对称矩阵，并且充分利用了其对称性

对称QR方法

- 对称QR方法就是求解对称特征值问题的QR方法
- 它是将QR方法应用于对称矩阵，并且充分利用了其对称性
- 此时上Hessenberg矩阵就是三对角对称矩阵

三对角化

- 若A是n阶实对称矩阵，并假定A的上Hessenberg分解为

$$Q^T A Q = T$$

其中Q是正交矩阵，T是上Hessenberg矩阵，则可知T是对称三对角阵

三对角化

- 若A是n阶实对称矩阵，并假定A的上Hessenberg分解为
$$Q^TAQ=T$$
其中Q是正交矩阵，T是上Hessenberg矩阵，则可知T是对称三对角阵
- 因此当处理的是对称矩阵时，上Hessenberg化就是三对角化

三对角化

- 若A是n阶实对称矩阵，并假定A的上Hessenberg分解为

$$Q^T AQ = T$$

其中Q是正交矩阵，T是上Hessenberg矩阵，则可知T是对称三对角阵

- 因此当处理的是对称矩阵时，上Hessenberg化就是三对角化
- 因此我们约化过程中可以充分利用对称性，使运算量大减

具体分析

- 对A进行分块：

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & v_0^T \\ v_0 & A_0 \end{pmatrix}$$

其中$\alpha_1 \in \mathbb{R}$.

具体分析

- 对A进行分块：
$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & v_0^T \\ v_0 & A_0 \end{pmatrix}$$
其中$\alpha_1 \in \mathbb{R}$.
- 利用Householder变换把A约化为上Hessenberg矩阵的第一步是把v_0转化为$\beta_0 e_1$，从而A_0变为新的$n-1$阶矩阵，我们对A_0进行类似分块，得到A_1，依次类推......

约化的第k步

- 计算Householder变换$\tilde{H}_k \in \mathbb{R}^{(n-k)\times(n-k)}$，使得

$$\tilde{H}_k v_{k-1} = \beta_k e_1, \quad \beta_k \in \mathbb{R}$$

约化的第k步

- 计算Householder变换$\tilde{H}_k \in \mathbb{R}^{(n-k)\times(n-k)}$，使得

$$\tilde{H}_k v_{k-1} = \beta_k e_1, \quad \beta_k \in \mathbb{R}$$

- 计算

$$\tilde{H}_k A_{k-1} \tilde{H}_k = \begin{pmatrix} \alpha_{k+1} & v_k^T \\ v_k & A_k \end{pmatrix}$$

分解结果

- 定义

$$T = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

$$Q = H_1 \cdots H_{n-2}, \quad H_k = \mathrm{diag}(I_k, \tilde{H}_k)$$

分解结果

- 定义

$$T = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

$$Q = H_1 \cdots H_{n-2}, \quad H_k = \mathrm{diag}(I_k, \tilde{H}_k)$$

- 则我们有$Q^TAQ = T$, 这称为A的三对角分解

运算量

- 第k步约化的主要工作是计算$\tilde{H}_k A_{k-1} \tilde{H}_k$

运算量

- 第k步约化的主要工作是计算$\tilde{H}_k A_{k-1} \tilde{H}_k$
- 设$\tilde{H}_k = I - \beta v v^T$, $v \in \mathbb{R}^{n-k}$, 由A_{k-1}的对称性，我们有

$$\tilde{H}_k A_{k-1} \tilde{H}_k = A_{k-1} - v w^T - w v^T$$

其中$w = u - \beta(v^T u)v/2$, $u = \beta A_{k-1} v$

运算量

- 第k步约化的主要工作是计算$\tilde{H}_k A_{k-1} \tilde{H}_k$
- 设$\tilde{H}_k = I - \beta v v^T$, $v \in \mathbb{R}^{n-k}$, 由A_{k-1}的对称性，我们有

$$\tilde{H}_k A_{k-1} \tilde{H}_k = A_{k-1} - v w^T - w v^T$$

其中$w = u - \beta(v^T u)v/2$, $u = \beta A_{k-1} v$

- 利用这一等式计算，运算量仅为$4(n-k)^2$, 从而总体运算量为$4n^3/3$次乘法运算

带原点位移的QR迭代

- 完成了三对角分解后，接下来就是选取适当的位移进行QR迭代

带原点位移的QR迭代

- 完成了三对角分解后，接下来就是选取适当的位移进行QR迭代
- 由于此时特征值全是实数，因此没有必要进行双重步位移

带原点位移的QR迭代

- 完成了三对角分解后，接下来就是选取适当的位移进行QR迭代
- 由于此时特征值全是实数，因此没有必要进行双重步位移
- 带原点位移的QR迭代格式为

$$
\begin{aligned}
T_k - \mu_k I &= Q_k R_k \quad (\text{QR分解}) \\
T_{k+1} &= R_k Q_k + \mu_k I, \quad k = 0, 1, \ldots
\end{aligned}
$$

其中$T_0 = T$是对称三对角阵

性质保持

- 根据QR迭代保持上Hessenberg形和对称性的特点可知T_k都是对称三对角阵

性质保持

- 根据QR迭代保持上Hessenberg形和对称性的特点可知T_k都是对称三对角阵
- 与非对称QR方法一样，我们这里也假定迭代中所出现的T_k都是不可约的

位移的选取

- 与非对称QR迭代中一样，最简单的做法是取μ_k为T_k右下角元素

位移的选取

- 与非对称QR迭代中一样，最简单的做法是取μ_k为T_k右下角元素
- 但此时有一个更好的取法，即Wilkinson位移

位移的选取

- 与非对称QR迭代中一样，最简单的做法是取μ_k为T_k右下角元素
- 但此时有一个更好的取法，即Wilkinson位移
- 设T_k右下角的2×2阶矩阵为$\begin{pmatrix} \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$，我们取$\mu_k$为该矩阵的两个特征值之中靠近$\alpha_n$的那一个，即

$$\mu_k = \alpha_n + \delta - \operatorname{sgn}(\delta)\sqrt{\delta^2 + \beta_{n-1}^2}$$

其中$\delta = (\alpha_{n-1} - \alpha_n)/2$

两种选取的对比

- 两种位移最终都是三次收敛的

两种选取的对比

- 两种位移最终都是三次收敛的
- Wilkinson论证了为什么后者优于前者的理由

一次对称QR迭代的实现

- 假设一次对称QR迭代的形式为

$$T - \mu I = QR, \quad \tilde{T} = RQ + \mu I$$

一次对称QR迭代的实现

- 假设一次对称QR迭代的形式为
$$T - \mu I = QR, \quad \tilde{T} = RQ + \mu I$$
- 当然可以利用Givens变换直接实现$T - \mu I$的QR分解，进而完成一步迭代

一次对称QR迭代的实现

- 假设一次对称QR迭代的形式为

$$T - \mu I = QR, \quad \tilde{T} = RQ + \mu I$$

- 当然可以利用Givens变换直接实现$T - \mu I$的QR分解，进而完成一步迭代
- 更漂亮的做法是以隐含的方式实现由T到$\tilde{T}$的变换

基本想法

- 根据上Hessenberg约化的唯一性定理，对于$\tilde{T} = Q^T TQ$，$\tilde{T}$本质上是由Q的第一列完全确定的

基本想法

- 根据上Hessenberg约化的唯一性定理，对于$\tilde{T} = Q^T T Q$，$\tilde{T}$本质上是由Q的第一列完全确定的
- 利用Givens变换对$T - \mu I$进行QR分解，那么$Qe_1 = G_1 e_1$，这里$G_1 = G(1, 2, \theta)$ 使得

$$G(1,2,\theta)\begin{pmatrix} \alpha_1 - \mu \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_1 - \mu \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix}$$

后续约化

- 令$B = G_1TG_1^T$, 则B的左上3×3阶矩阵非零，即仅比对称三对角阵多两个非零元

后续约化

- 令$B = G_1 T G_1^T$，则B的左上3×3阶矩阵非零，即仅比对称三对角阵多两个非零元
- 将B再用$n-1$个Givens变换约化为三对角阵$\tilde{T}$

后续约化

- 令$B = G_1 T G_1^T$，则B的左上3×3阶矩阵非零，即仅比对称三对角阵多两个非零元
- 将B再用$n-1$个Givens变换约化为三对角阵$\tilde{T}$
- 如此即为带Wilkinson位移的隐式对称QR迭代算法

隐式对称QR算法

- 类比于非对称QR算法，综合前面的讨论，我们可以得到隐式对称QR算法

隐式对称QR算法

- 类比于非对称QR算法，综合前面的讨论，我们可以得到隐式对称QR算法
- 此时算法的输出为对角阵，元素是A的特征值

隐式对称QR算法

- 类比于非对称QR算法，综合前面的讨论，我们可以得到隐式对称QR算法
- 此时算法的输出为对角阵，元素是A的特征值
- 只计算特征值，算法运算量约为$4n^3/3$

隐式对称QR算法

- 类比于非对称QR算法，综合前面的讨论，我们可以得到隐式对称QR算法
- 此时算法的输出为对角阵，元素是A的特征值
- 只计算特征值，算法运算量约为$4n^3/3$
- 这是矩阵计算中最漂亮的算法之一，它是数值稳定的

Jacobi方法

- Jacobi方法是求实对称矩阵全部特征值和特征向量的最古老的方法之一

Jacobi方法

- Jacobi方法是求实对称矩阵全部特征值和特征向量的最古老的方法之一
- 它是由C.G.J. Jacobi于1846年首先提出的

Jacobi方法

- Jacobi方法是求实对称矩阵全部特征值和特征向量的最古老的方法之一
- 它是由C.G.J. Jacobi于1846年首先提出的
- 该方法利用了实对称矩阵可以正交相似变换约化为对角阵的性质，用一系列适当选取的平面旋转变换将给定矩阵约化为对角阵

Jacobi方法

- Jacobi方法是求实对称矩阵全部特征值和特征向量的最古老的方法之一
- 它是由C.G.J. Jacobi于1846年首先提出的
- 该方法利用了实对称矩阵可以正交相似变换约化为对角阵的性质，用一系列适当选取的平面旋转变换将给定矩阵约化为对角阵
- 它的速度相比对称QR方法要相差很远，但它编程简单，并行效率高

Jacobi方法的目标

- 设$A = (\alpha_{ij})$是$n \times n$实对称矩阵

Jacobi方法的目标

- 设$A=(\alpha_{ij})$是$n\times n$实对称矩阵
- Jacobi方法的目标就是将A的非对角"范数" $E(A)$逐步约化为零：

$$E(A)=\left(\|A\|_F^2-\sum_{i=1}^{n}\alpha_{ii}^2\right)^{1/2}=\left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1,j\neq i}^{n}\alpha_{ij}^2\right)^{1/2}$$

Jacobi方法的目标

- 设$A = (\alpha_{ij})$是$n \times n$实对称矩阵
- Jacobi方法的目标就是将A的非对角"范数" $E(A)$逐步约化为零：

$$E(A) = \left(\|A\|_F^2 - \sum_{i=1}^{n} \alpha_{ii}^2 \right)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \alpha_{ij}^2 \right)^{1/2}$$

- 所采用的基本工具就是由Givens变换定义的平面旋转变换

Jacobi变换

- Givens变换$G(p,q,\theta)$也记作$J(p,q,\theta)$

$$
\begin{aligned}
J(p,q,\theta) = I &+ (\cos\theta - 1)(e_pe_p^T + e_qe_q^T) \\
&+ \sin\theta(e_pe_q^T - e_qe_p^T)
\end{aligned}
$$

Jacobi变换

- Givens变换$G(p,q,\theta)$也记作$J(p,q,\theta)$

$$\begin{aligned}J(p,q,\theta) = I &+ (\cos\theta - 1)(e_p e_p^T + e_q e_q^T)\\ &+ \sin\theta(e_p e_q^T - e_q e_p^T)\end{aligned}$$

- 此时假定$p < q$

Jacobi变换

- Givens变换$G(p,q,\theta)$也记作$J(p,q,\theta)$

$$\begin{aligned}J(p,q,\theta) = I &+ (\cos\theta - 1)(e_pe_p^T + e_qe_q^T)\\ &+ \sin\theta(e_pe_q^T - e_qe_p^T)\end{aligned}$$

- 此时假定$p<q$
- 这一变换也称为(p,q)平面的Jacobi变换

Jacobi方法一次约化的步骤

1. 选择旋转平面(p, q), $1 \leqslant p < q \leqslant n$

Jacobi方法一次约化的步骤

1. 选择旋转平面(p, q), $1 \leqslant p < q \leqslant n$
2. 确定旋转角θ使得

$$\begin{pmatrix} \beta_{pp} & \beta_{pq} \\ \beta_{qp} & \beta_{qq} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \alpha_{pp} & \alpha_{pq} \\ \alpha_{qp} & \alpha_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$

为对角阵，其中$c = \cos\theta$, $s = \sin\theta$

Jacobi方法一次约化的步骤

1. 选择旋转平面(p, q), $1 \leqslant p < q \leqslant n$
2. 确定旋转角θ使得

$$\begin{pmatrix} \beta_{pp} & \beta_{pq} \\ \beta_{qp} & \beta_{qq} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \alpha_{pp} & \alpha_{pq} \\ \alpha_{qp} & \alpha_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$

为对角阵，其中$c = \cos\theta$, $s = \sin\theta$

3. 对A进行相似变换：$B = (\beta_{ij}) = J^TAJ$, 其中$J = J(p, q, \theta)$

A与B的关系

- 矩阵A与B只在第p行/列和第q行/列不同，它们之间有关系如下：

$$\beta_{ip} = \beta_{pi} = c\alpha_{ip} - s\alpha_{iq}, i \neq p, q$$
$$\beta_{iq} = \beta_{qi} = s\alpha_{ip} + c\alpha_{iq}, i \neq p, q$$
$$\beta_{pp} = c^2\alpha_{pp} - 2sc\alpha_{pq} + s^2\alpha_{qq}$$
$$\beta_{qq} = s^2\alpha_{pp} + 2sc\alpha_{pq} + c^2\alpha_{qq}$$
$$\beta_{pq} = \beta_{qp} = (c^2 - s^2)\alpha_{pq} + sc(\alpha_{pp} - \alpha_{qq})$$

c, s的计算

- 先假设选定了旋转平面(p, q)

c, s的计算

- 先假设选定了旋转平面(p, q)
- 下面根据$\beta_{pq} = \beta_{qp} = 0$求出$c, s$

c, s的计算

- 先假设选定了旋转平面(p, q)
- 下面根据$\beta_{pq} = \beta_{qp} = 0$求出$c, s$
- 由β_{pq}的表达式可知，这等价于计算c, s使得

$$(c^2 - s^2)\alpha_{pq} + sc(\alpha_{pp} - \alpha_{qq}) = 0$$

c, s的计算

- 先假设选定了旋转平面(p, q)
- 下面根据$\beta_{pq} = \beta_{qp} = 0$求出$c, s$
- 由β_{pq}的表达式可知，这等价于计算c, s使得

$$(c^2 - s^2)\alpha_{pq} + sc(\alpha_{pp} - \alpha_{qq}) = 0$$

- 若$\alpha_{pq} = 0$，可取$c = 1, s = 0$

$\alpha_{pq} \neq 0$的情形

- 如果$\alpha_{pq} \neq 0$，令

$$\tau = \frac{\alpha_{qq} - \alpha_{pp}}{2\alpha_{pq}}, t = \tan\theta = \frac{s}{c}$$

$\alpha_{pq} \neq 0$的情形

- 如果$\alpha_{pq} \neq 0$，令

$$\tau = \frac{\alpha_{qq} - \alpha_{pp}}{2\alpha_{pq}}, t = \tan\theta = \frac{s}{c}$$

- 由此得到方程$t^2 + 2\tau t - 1 = 0$

$\alpha_{pq} \neq 0$的情形

- 如果$\alpha_{pq} \neq 0$，令

$$\tau = \frac{\alpha_{qq} - \alpha_{pp}}{2\alpha_{pq}}, t = \tan\theta = \frac{s}{c}$$

- 由此得到方程$t^2 + 2\tau t - 1 = 0$
- 如此t有两种选择。选择其绝对值较小的即可，从而

$$t = \frac{\mathrm{sgn}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2}}$$

- 如此选择保证了旋转角θ满足$|\theta| \leqslant \pi/4$，这对Jacobi方法的收敛性是至关重要的

- 如此选择保证了旋转角θ满足$|\theta| \leqslant \pi/4$, 这对Jacobi方法的收敛性是至关重要的
- 细节见后面的收敛性分析

- 如此选择保证了旋转角θ满足$|\theta| \leqslant \pi/4$, 这对Jacobi方法的收敛性是至关重要的
- 细节见后面的收敛性分析
- 确定了t之后，c, s可由下面的公式确定：

$$c = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}, \quad s = tc$$

Frobenius范数的变化

- 由于Frobenius范数对正交变换保持不变，从而$\|B\|_F = \|A\|_F$，即

$$\alpha_{pp}^2 + \alpha_{qq}^2 + 2\alpha_{pq}^2 = \beta_{pp}^2 + \beta_{qq}^2$$

Frobenius范数的变化

- 由于Frobenius范数对正交变换保持不变，从而$\|B\|_F = \|A\|_F$，即

$$\alpha_{pp}^2 + \alpha_{qq}^2 + 2\alpha_{pq}^2 = \beta_{pp}^2 + \beta_{qq}^2$$

- 如此我们有

$$\begin{aligned} E(B)^2 &= \|B\|_F^2 - \sum_{i=1}^n \beta_{ii}^2 \\ &= \|A\|_F^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_{ii}^2 + (\alpha_{pp}^2 + \alpha_{qq}^2 - \beta_{pp}^2 - \beta_{qq}^2) \\ &= E(A)^2 - 2\alpha_{pq}^2 \end{aligned}$$

旋转平面的选取

- 我们的目标是使$E(B)$尽可能得小，因此(p,q)的最佳选择应使

$$|\alpha_{pq}| = \max_{1 \leqslant i < j \leqslant n} |\alpha_{ij}|$$

即应选取非对角元中绝对值最大者所在的行列为旋转平面

经典Jacobi方法

- 根据上述原则选择旋转平面(p, q), 然后再确定c, s的方法就是经典Jacobi方法

经典Jacobi方法

- 根据上述原则选择旋转平面(p, q), 然后再确定c, s的方法就是经典Jacobi方法
- 其基本迭代格式如下：

$$A_k = (\alpha_{ij}^{(k)}) = J_k^T A_{k-1} J_k, \quad k = 1, 2, \ldots$$

其中$A_0 = A$, J_k是对A_{k-1}如前所确定的Jacobi变换

收敛定理

定理

存在A的特征值的一个排列$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$, 使得

$$\lim_{k\to\infty} A_k = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$$

定理证明:$E(A_k) \to 0$

- 我们先证明随着迭代次数k的增加，A_k的非对角“范数”$E(A_k) \to 0$

定理证明:$E(A_k) \to 0$

- 我们先证明随着迭代次数k的增加，A_k的非对角“范数”$E(A_k) \to 0$
- 根据前面的讨论，我们有

$$E(A_k)^2 = E(A_{k-1})^2 - 2(\alpha_{pq}^{(k-1)})^2$$

其中$\alpha_{pq}^{(k-1)}$是A_{k-1}的非对角元之中绝对值最大者

定理证明:$E(A_k) \to 0$

- 注意到

$$E(A_{k-1})^2 \leqslant (n^2 - n)(\alpha_{pq}^{(k-1)})^2$$

定理证明:$E(A_k) \to 0$

- 注意到

$$E(A_{k-1})^2 \leqslant (n^2 - n)(\alpha_{pq}^{(k-1)})^2$$

- 从而有

$$E(A_k)^2 \leqslant \left(1 - \frac{2}{n^2 - n}\right) E(A_{k-1})^2$$

定理证明:$E(A_k) \to 0$

- 注意到

$$E(A_{k-1})^2 \leqslant (n^2 - n)(\alpha_{pq}^{(k-1)})^2$$

- 从而有

$$E(A_k)^2 \leqslant \left(1 - \frac{2}{n^2 - n}\right) E(A_{k-1})^2$$

- 系数为与k无关的绝对值小于1的数，由此$\lim\limits_{k\to\infty} E(A_k) = 0$

定理的继续证明

- 下面证明$\alpha_{ii}^{(k)} \to \lambda_i$, $k \to \infty$

定理的继续证明

- 下面证明$\alpha_{ii}^{(k)} \to \lambda_i$, $k \to \infty$
- 假设A的互不相同的特征值之间最小距离为δ

定理的继续证明

- 下面证明$\alpha_{ii}^{(k)} \to \lambda_i$, $k \to \infty$
- 假设A的互不相同的特征值之间最小距离为δ
- 任取ε满足$0 < \varepsilon < \delta/4$, 由$\lim_{k\to\infty} E(A_k) = 0$ 知存在k_0使得当$k \geqslant k_0$时有$E(A_k) < \varepsilon < \delta/4$

- 由于$\lambda(A_{k_0}) = \lambda(A)$, 对矩阵$A_{k_0}$与其对角元作成的对角阵

$$D_{k_0} = \mathrm{diag}(\alpha_{11}^{(k_0)}, \alpha_{22}^{(k_0)}, \ldots, \alpha_{nn}^{(k_0)})$$

应用本章开始给出的Weyl定理可知，存在A的特征值的一个排列$\lambda_1, \ldots, \lambda_n$使得对$i = 1, \ldots, n$

$$\left|\lambda_i - \alpha_{ii}^{(k_0)}\right| \leqslant \|A_{k_0} - D_{k_0}\|_2 \leqslant E(A_{k_0}) < \varepsilon < \delta/4$$

- 由于$\lambda(A_{k_0}) = \lambda(A)$, 对矩阵$A_{k_0}$与其对角元作成的对角阵

$$D_{k_0} = \mathrm{diag}(\alpha_{11}^{(k_0)}, \alpha_{22}^{(k_0)}, \ldots, \alpha_{nn}^{(k_0)})$$

应用本章开始给出的Weyl定理可知，存在A的特征值的一个排列$\lambda_1, \ldots, \lambda_n$使得对$i = 1, \ldots, n$

$$\left|\lambda_i - \alpha_{ii}^{(k_0)}\right| \leqslant \|A_{k_0} - D_{k_0}\|_2 \leqslant E(A_{k_0}) < \varepsilon < \delta/4$$

- 目前来说，特征值的排列是与k_0有关的

- 实际上，可以证明这种排列对任意$k \geqslant k_0$都是一致的（暂缺）

- 实际上，可以证明这种排列对任意$k \geqslant k_0$都是一致的（暂缺）
- 也说是说，只要能证明上式蕴涵着

$$\left|\lambda_i - \alpha_{ii}^{(k_0+1)}\right| < \varepsilon, i = 1, \ldots, n$$

则由归纳法可知对一切$k \geqslant k_0$有

$$\left|\lambda_i - \alpha_{ii}^{(k)}\right| < \varepsilon, i = 1, \ldots, n$$

从而定理得证

欠缺的一环

- 由于A_{k_0+1}与A_{k_0}的对角元只可能有两个不同：$\alpha_{pp}^{(k_0+1)}$和$\alpha_{qq}^{(k_0+1)}$，所以只需要对$i = p, q$证明欠缺的蕴涵关系成立即可

欠缺的一环

- 由于A_{k_0+1}与A_{k_0}的对角元只可能有两个不同：$\alpha_{pp}^{(k_0+1)}$和$\alpha_{qq}^{(k_0+1)}$，所以只需要对$i=p,q$证明欠缺的蕴涵关系成立即可
- 由于$t=s/c$, 根据c,s计算过程，$\alpha_{pq}^{(k_0)}(c^2-s^2)+(\alpha_{pp}^{(k_0)}-\alpha_{qq}^{(k_0)})cs=0$, 所以$(1-t^2)\alpha_{pq}^{(k_0)}=t(\alpha_{qq}^{(k_0)}-\alpha_{pp}^{(k_0)})$

- 根据迭代格式，我们有

$$
\begin{aligned}
\alpha_{pp}^{(k_0+1)} &= \alpha_{pp}^{(k_0)} + c^2\left(-2t\alpha_{pq}^{(k_0)} + t^2(\alpha_{qq}^{(k_0)} - \alpha_{pp}^{(k_0)})\right) \\
&= \alpha_{pp}^{(k_0)} + c^2\left(-2t\alpha_{pq}^{(k_0)} + t(1-t^2)\alpha_{pq}^{(k_0)}\right) \\
&= \alpha_{pp}^{(k_0)} - t\alpha_{pq}^{(k_0)} \\
\alpha_{qq}^{(k_0+1)} &= \alpha_{qq}^{(k_0)} + t\alpha_{pq}^{(k_0)}
\end{aligned}
$$

- 根据迭代格式，我们有

$$\begin{aligned}
\alpha_{pp}^{(k_0+1)} &= \alpha_{pp}^{(k_0)} + c^2\left(-2t\alpha_{pq}^{(k_0)} + t^2(\alpha_{qq}^{(k_0)} - \alpha_{pp}^{(k_0)})\right) \\
&= \alpha_{pp}^{(k_0)} + c^2\left(-2t\alpha_{pq}^{(k_0)} + t(1-t^2)\alpha_{pq}^{(k_0)}\right) \\
&= \alpha_{pp}^{(k_0)} - t\alpha_{pq}^{(k_0)} \\
\alpha_{qq}^{(k_0+1)} &= \alpha_{qq}^{(k_0)} + t\alpha_{pq}^{(k_0)}
\end{aligned}$$

- 从而对任何$\lambda_j \neq \lambda_p$有(注意$|t| \leqslant 1$)

$$\begin{aligned}
\left|\alpha_{pp}^{(k_0+1)} - \lambda_j\right| &= \left|\alpha_{pp}^{(k_0)} - \lambda_p + \lambda_p - \lambda_j - t\alpha_{pq}^{(k_0)}\right| \\
&\geqslant |\lambda_p - \lambda_j| - \left|\alpha_{pp}^{(k_0)} - \lambda_p\right| - |t|E(A_{k_0}) \\
&\geqslant \delta - \varepsilon - \varepsilon \geqslant 2\varepsilon
\end{aligned}$$

- 由于$\lambda(A_{k_0+1}) = \lambda(A)$, $E(A_{k_0+1}) < \varepsilon$, 所以根据Weyl定理可知，$\alpha_{pp}^{(k_0+1)}$必与$A$的某个特征值之间的距离小于$\varepsilon$

- 由于$\lambda(A_{k_0+1}) = \lambda(A)$, $E(A_{k_0+1}) < \varepsilon$, 所以根据Weyl定理可知，$\alpha_{pp}^{(k_0+1)}$必与$A$的某个特征值之间的距离小于$\varepsilon$
- 据前结论，$\left|\lambda_i - \alpha_{ii}^{(k)}\right| < \varepsilon$在$i = p$时成立

- 由于$\lambda(A_{k_0+1}) = \lambda(A)$, $E(A_{k_0+1}) < \varepsilon$, 所以根据Weyl定理可知，$\alpha_{pp}^{(k_0+1)}$必与$A$的某个特征值之间的距离小于$\varepsilon$
- 据前结论，$\left|\lambda_i - \alpha_{ii}^{(k)}\right| < \varepsilon$在$i = p$时成立
- 类似可证该不等式$i = q$时成立

- 由于$\lambda(A_{k_0+1}) = \lambda(A)$, $E(A_{k_0+1}) < \varepsilon$, 所以根据Weyl定理可知，$\alpha_{pp}^{(k_0+1)}$必与$A$的某个特征值之间的距离小于$\varepsilon$
- 据前结论，$\left|\lambda_i - \alpha_{ii}^{(k)}\right| < \varepsilon$在$i = p$时成立
- 类似可证该不等式$i = q$时成立
- 定理证明完成

注解

- 从定理的证明可见，$|t| \leqslant 1$对经典Jacobi方法的收敛起了至关重要的作用。它保证了迭代产生的每一个对角元一致地趋向于A的某一个固定的特征值

注解

- 从定理的证明可见，$|t| \leqslant 1$对经典Jacobi方法的收敛起了至关重要的作用。它保证了迭代产生的每一个对角元一致地趋向于A的某一个固定的特征值
- 证明也给出了经典Jacobi方法的收敛速度的一个粗略的估计：

$$E(A_k)^2 \leqslant \left(1 - \frac{2}{n^2 - n}\right)^k E(A_0)^2$$

注解

- 从定理的证明可见，$|t| \leqslant 1$对经典Jacobi方法的收敛起了至关重要的作用。它保证了迭代产生的每一个对角元一致地趋向于A的某一个固定的特征值
- 证明也给出了经典Jacobi方法的收敛速度的一个粗略的估计：

$$E(A_k)^2 \leqslant \left(1 - \frac{2}{n^2 - n}\right)^k E(A_0)^2$$

- 这表明经典Jacobi方法是线性收敛的

扫描

- 通常将$N=(n^2-n)/2$次Jacobi迭代称为一次扫描

扫描

- 通常将$N=(n^2-n)/2$次Jacobi迭代称为一次扫描
- 可以证明经典Jacobi方法的渐近收敛速度是二次的，即存在常数$c>0$, 对充分大的k

$$E(A_{k+N}) \leqslant cE(A_k)^2$$

扫描

- 通常将$N=(n^2-n)/2$次Jacobi迭代称为一次扫描
- 可以证明经典Jacobi方法的渐近收敛速度是二次的，即存在常数$c>0$, 对充分大的k

$$E(A_{k+N})\leqslant cE(A_k)^2$$

- 所以每扫描一次，其非对角"范数"将以平方收敛的速度接近于零

循环Jacobi方法

- 经典Jacobi方法中每进行一次相似变换，所需的运算仅为$O(n)$, 而确定旋转平面却需要进行$(n^2-n)/2$个元素比较

循环Jacobi方法

- 经典Jacobi方法中每进行一次相似变换，所需的运算仅为$O(n)$, 而确定旋转平面却需要进行$(n^2 - n)/2$个元素比较
- 所以经典Jacobi方法的大部分时间用在了寻找最佳的旋转平面上

循环Jacobi方法

- 经典Jacobi方法中每进行一次相似变换，所需的运算仅为$O(n)$, 而确定旋转平面却需要进行$(n^2-n)/2$个元素比较
- 所以经典Jacobi方法的大部分时间用在了寻找最佳的旋转平面上
- 一种变通方法：直接按某种预定顺序对每个非对角元消去一次，这就是所谓的循环Jacobi方法

自然的遍历顺序

- 在循环Jacobi方法中，最自然的遍历非对角元的顺序是

$$(1,2),\dots,(1,n);(2,3),\dots,(2,n);\dots,(n-1,n)$$

自然的遍历顺序

- 在循环Jacobi方法中，最自然的遍历非对角元的顺序是

$$(1,2),\dots,(1,n);(2,3),\dots,(2,n);\dots,(n-1,n)$$

- 这种方法也可以证明是渐近平方收敛的，但它相比于经典Jacobi方法要快很多

变形：过关Jacobi方法

- 在实际计算中用得最多的是循环Jacobi方法的一种变体，即过关Jacobi方法

变形：过关Jacobi方法

- 在实际计算中用得最多的是循环Jacobi方法的一种变体，即过关Jacobi方法
- 在该变体中，先确定一个正数（称为关值），在一次扫描中只对那些绝对值超过关值的非对角元所在的平面进行Jacobi变换

变形：过关Jacobi方法

- 在实际计算中用得最多的是循环Jacobi方法的一种变体，即过关Jacobi方法
- 在该变体中，先确定一个正数（称为关值），在一次扫描中只对那些绝对值超过关值的非对角元所在的平面进行Jacobi变换
- 如此反复扫描，当所有的非对角元的绝对值都不超过关值时，减小关值，再进行类似扫描

变形：过关Jacobi方法

- 在实际计算中用得最多的是循环Jacobi方法的一种变体，即过关Jacobi方法
- 在该变体中，先确定一个正数（称为关值），在一次扫描中只对那些绝对值超过关值的非对角元所在的平面进行Jacobi变换
- 如此反复扫描，当所有的非对角元的绝对值都不超过关值时，减小关值，再进行类似扫描
- 直至关值充分小时结束

关值的选取

- 常用的关值是按如下方式选取的：

$$\delta_0 = E(A), \delta_k = \frac{\delta_{k-1}}{\sigma}$$

其中$\sigma \geqslant n$是一个固定的正数

关值的选取

- 常用的关值是按如下方式选取的：

$$\delta_0 = E(A), \delta_k = \frac{\delta_{k-1}}{\sigma}$$

其中$\sigma \geqslant n$是一个固定的正数

- 可以证明：针对如此选取的关值，过关Jacobi方法是收敛的

Jacobi方法中特征向量的计算

- 经过k次变换后迭代停止，则我们有

$$A_k = Q_k^T A Q_k$$

其中$Q_k = J_1 J_2 \cdots J_k$

Jacobi方法中特征向量的计算

- 经过k次变换后迭代停止，则我们有
$$A_k = Q_k^T A Q_k$$
其中$Q_k = J_1 J_2 \cdots J_k$
- 由于A_k的非对角元已非常小，那么A的对角元就是特征值的近似，Q_k的列向量就是A的特征向量近似

二分法

- 本节介绍求一个实对称三对角阵T的任意指定特征值的二分法

二分法

- 本节介绍求一个实对称三对角阵T的任意指定特征值的二分法
- 设T的对角元为α_i, $i = 1, \ldots, n$; 次对角元为β_i, $i = 2, \ldots, n$

二分法

- 本节介绍求一个实对称三对角阵T的任意指定特征值的二分法
- 设T的对角元为α_i, $i=1,\ldots,n$; 次对角元为β_i, $i=2,\ldots,n$
- 假定次对角元非零：不可约实对称三对角阵

顺序主子式

- 记$p_i(\lambda)$表示$T-\lambda I$的i阶顺序主子式

顺序主子式

- 记$p_i(\lambda)$表示$T-\lambda I$的i阶顺序主子式
- 则$p_i(\lambda)$满足下面的三项递推公式：

$$p_0(\lambda)=1, \quad p_1(\lambda)=\alpha_1-\lambda$$
$$p_i(\lambda)=(\alpha_i-\lambda)p_{i-1}(\lambda)-\beta_i^2 p_{i-2}(\lambda)$$
$$i=2,\ldots,n$$

顺序主子式

- 记$p_i(\lambda)$表示$T-\lambda I$的i阶顺序主子式
- 则$p_i(\lambda)$满足下面的三项递推公式：

$$p_0(\lambda)=1,\quad p_1(\lambda)=\alpha_1-\lambda$$
$$p_i(\lambda)=(\alpha_i-\lambda)p_{i-1}(\lambda)-\beta_i^2p_{i-2}(\lambda)$$
$$i=2,\ldots,n$$

- 由于T实对称，所以$p_i(\lambda)$的根都是实的

例

- 设 $T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$, 则

$$
\begin{aligned}
p_0(\lambda) &= 1 \\
p_1(\lambda) &= 1 - \lambda \\
p_2(\lambda) &= (1-\lambda)^2 - 1 \\
p_3(\lambda) &= (1-\lambda)^3 - 2(1-\lambda)
\end{aligned}
$$

$p_i(\lambda)$的性质

定理

1. 存在正数M，使得当$\lambda > M$时，$p_i(-\lambda) > 0$，而$p_i(\lambda)$的符号为$(-1)^i$

$p_i(\lambda)$的性质

定理

1. 存在正数M，使得当$\lambda > M$时，$p_i(-\lambda) > 0$，而$p_i(\lambda)$的符号为$(-1)^i$
2. 相邻两个多项式没有公共根

$p_i(\lambda)$的性质

定理

1. 存在正数M, 使得当$\lambda > M$时，$p_i(-\lambda) > 0$, 而$p_i(\lambda)$的符号为$(-1)^i$
2. 相邻两个多项式没有公共根
3. 若$p_i(\mu) = 0$, 则$p_{i-1}(\mu)p_{i+1}(\mu) < 0$

$p_i(\lambda)$的性质

定理

1. 存在正数M, 使得当$\lambda > M$时，$p_i(-\lambda) > 0$, 而$p_i(\lambda)$的符号为$(-1)^i$
2. 相邻两个多项式没有公共根
3. 若$p_i(\mu) = 0$, 则$p_{i-1}(\mu)p_{i+1}(\mu) < 0$
4. $p_i(\lambda)$的根全是单重的，并且$p_i(\lambda)$的根严格分离$p_{i+1}(\lambda)$的根

性质1,2的证明

- 根据$p_i(\lambda)$的定义，其首项为$(-1)^i\lambda^i$, 所以性质1成立

性质1,2的证明

- 根据$p_i(\lambda)$的定义，其首项为$(-1)^i\lambda^i$, 所以性质1成立
- 性质2的证明：采用反证法。假设存在某个i, $p_{i-1}(\lambda)$与$p_i(\lambda)$有公共根μ, 那么由三项递推公式

$$0 = p_i(\mu) = (\alpha_i - \mu)p_{i-1}(\mu) - \beta_i^2 p_{i-2}(\mu)$$

而$\beta_i \neq 0$, 所以有$p_{i-2}(\mu) = 0$, 以此类推可得$p_0(\mu) = 0$, 矛盾

性质3的证明

- 设$p_i(\mu) = 0$

性质3的证明

- 设$p_i(\mu) = 0$
- 代入三项递推关系，可得

$$p_{i+1}(\mu) = -\beta_{i+1}^2 p_{i-1}(\mu)$$

性质3的证明

- 设$p_i(\mu) = 0$
- 代入三项递推关系，可得

$$p_{i+1}(\mu) = -\beta_{i+1}^2 p_{i-1}(\mu)$$

- 由性质2，μ不是$p_{i+1}(\lambda)$和$p_{i-1}(\lambda)$的根，从而可知$p_{i-1}(\mu)p_{i+1}(\mu) < 0$

性质4的证明

采用数学归纳法

- 当$i=1$时$p_1(\lambda)=\alpha_1-\lambda$, 即$\alpha_1$是$p_1(\lambda)$的单根

性质4的证明

采用数学归纳法

- 当$i=1$时$p_1(\lambda)=\alpha_1-\lambda$，即$\alpha_1$是$p_1(\lambda)$的单根
- 当$i=2$时，由于$p_2(\alpha_1)=-\beta_2^2<0$，而且根据性质1，当$\lambda$充分大时有$p_2(\pm\lambda)>0$，因此在$(-\infty,\alpha_1)$和$(\alpha_1,+\infty)$之内各有$p_2(\lambda)$的一个根，而且$\alpha_1$严格分隔这两个根

性质4的证明

采用数学归纳法

- 当$i=1$时$p_1(\lambda)=\alpha_1-\lambda$, 即$\alpha_1$是$p_1(\lambda)$的单根
- 当$i=2$时，由于$p_2(\alpha_1)=-\beta_2^2<0$, 而且根据性质1, 当$\lambda$充分大时有$p_2(\pm\lambda)>0$, 因此在$(-\infty,\alpha_1)$和$(\alpha_1,+\infty)$之内各有$p_2(\lambda)$的一个根，而且$\alpha_1$严格分隔这两个根
- 假设性质在$i=k$时成立，即$p_{k-1}(\lambda)$和$p_k(\lambda)$的根都是单根，并且$p_{k-1}(\lambda)$的根严格分隔$p_k(\lambda)$的根

- 设$p_{k-1}(\lambda)$和$p_k(\lambda)$的根分别为

$$\nu_1 < \nu_2 < \cdots < \nu_{k-1}, \mu_1 < \mu_2 < \cdots < \mu_k$$

则由归纳假设可知

$$\mu_1 < \nu_1 < \mu_2 < \nu_2 < \cdots < \nu_{k-1} < \mu_k$$

- 设$p_{k-1}(\lambda)$和$p_k(\lambda)$的根分别为
$$\nu_1 < \nu_2 < \cdots < \nu_{k-1}, \mu_1 < \mu_2 < \cdots < \mu_k$$
则由归纳假设可知
$$\mu_1 < \nu_1 < \mu_2 < \nu_2 < \cdots < \nu_{k-1} < \mu_k$$
- 应用三项递推公式可有
$$p_{k+1}(\mu_j) = -\beta_{k+1}^2 p_{k-1}(\mu_j), j = 1, \ldots, k$$

- 根据性质1和$p_{k-1}(\nu_j)=0\ (1\leqslant j\leqslant k-1)$可知$(-1)^{j-1}p_{k-1}(\mu_j)>0,\ j=1,2,\ldots,k$

- 根据性质1和$p_{k-1}(\nu_j) = 0\ (1 \leqslant j \leqslant k-1)$可知$(-1)^{j-1} p_{k-1}(\mu_j) > 0,\ j = 1, 2, \ldots, k$
- 于是$(-1)^j p_{k+1}(\mu_j) > 0,\ j = 1, 2, \ldots, k$

- 根据性质1和$p_{k-1}(\nu_j) = 0$ $(1 \leqslant j \leqslant k-1)$可知$(-1)^{j-1}p_{k-1}(\mu_j) > 0$, $j = 1, 2, \ldots, k$
- 于是$(-1)^j p_{k+1}(\mu_j) > 0$, $j = 1, 2, \ldots, k$
- 再注意到对充分大的正数μ有$p_{k+1}(-\mu) > 0$, $(-1)^{k+1}p_{k+1}(\mu) > 0$, 所以在区间$(-\infty, \mu_1)$, (μ_1, μ_2), $\ldots$, (μ_{k-1}, μ_k), $(\mu_k, +\infty)$内都有$p_{k+1}(\lambda)$的根

- 根据性质1和$p_{k-1}(\nu_j) = 0\ (1 \leqslant j \leqslant k-1)$可知$(-1)^{j-1} p_{k-1}(\mu_j) > 0$, $j = 1, 2, \ldots, k$
- 于是$(-1)^j p_{k+1}(\mu_j) > 0$, $j = 1, 2, \ldots, k$
- 再注意到对充分大的正数μ有$p_{k+1}(-\mu) > 0$, $(-1)^{k+1} p_{k+1}(\mu) > 0$, 所以在区间$(-\infty, \mu_1)$, (μ_1, μ_2), $\ldots$, (μ_{k-1}, μ_k), $(\mu_k, +\infty)$内都有$p_{k+1}(\lambda)$的根
- 这就完成了证明

变号数

- 根据性质可知，不可约三对角对称矩阵的特征值都是单重实数

变号数

- 根据性质可知，不可约三对角对称矩阵的特征值都是单重实数
- 对任意给定的实数μ，定义$s_k(\mu)$表示数列$p_0(\mu), p_1(\mu), \ldots, p_k(\mu)$的变号数

变号数

- 根据性质可知，不可约三对角对称矩阵的特征值都是单重实数
- 对任意给定的实数μ, 定义$s_k(\mu)$表示数列$p_0(\mu), p_1(\mu), \ldots, p_k(\mu)$的变号数
- 规定：如果$p_i(\mu) = 0$, 则$p_i(\mu)$与$p_{i-1}(\mu)$同号（注意，$p_{i-1}(\mu)$不可能也为零）

变号数

- 根据性质可知，不可约三对角对称矩阵的特征值都是单重实数
- 对任意给定的实数μ, 定义$s_k(\mu)$表示数列$p_0(\mu), p_1(\mu), \ldots, p_k(\mu)$的变号数
- 规定：如果$p_i(\mu) = 0$, 则$p_i(\mu)$与$p_{i-1}(\mu)$同号（注意，$p_{i-1}(\mu)$不可能也为零）
- 例：对前面的三阶矩阵例，$\mu = 1$, 则我们有

$$p_0(1) = 1, p_1(1) = 0, p_2(1) = -1, p_3(1) = 0$$

所以变号数$s_3(1) = 1$

变号数与根的个数

定理

若T为不可约对称三对角矩阵，则$s_k(\mu)$ $(1 \leqslant k \leqslant n)$恰好是$p_k(\lambda)$在区间$(-\infty, \mu)$内根的个数

推论

若T为不可约对称三对角矩阵，则$s_n(\mu)$ 恰好是T在区间$(-\infty, \mu)$内特征值的个数

定理的证明

采用数学归纳法

- 当$k=1$时定理显然成立

定理的证明

采用数学归纳法

- 当$k = 1$时定理显然成立
- 假设当$k = \ell$时定理成立

定理的证明

采用数学归纳法

- 当$k = 1$时定理显然成立
- 假设当$k = \ell$时定理成立
- 设$p_\ell(\lambda)$和$p_{\ell+1}(\lambda)$的根分别为

$$\mu_1 < \mu_2 < \cdots < \mu_\ell, \lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_{\ell+1}$$

则根据性质4,

$$\lambda_1 < \mu_1 < \lambda_2 < \mu_2 < \cdots < \mu_\ell < \lambda_{\ell+1}$$

- 设$s_\ell(\mu) = m$, 则由归纳假设可知$\mu_m < \mu \leqslant \mu_{m+1}$

- 设$s_\ell(\mu) = m$，则由归纳假设可知$\mu_m < \mu \leqslant \mu_{m+1}$
- 注意到$\mu_m < \lambda_{m+1} < \mu_{m+1}$，从而$\mu$所在的位置有两种可能性：

$$\lambda_m < \mu_m < \mu \leqslant \lambda_{m+1} \text{ 或 } \lambda_{m+1} < \mu \leqslant \mu_{m+1}$$

- 设$s_\ell(\mu) = m$, 则由归纳假设可知$\mu_m < \mu \leqslant \mu_{m+1}$
- 注意到$\mu_m < \lambda_{m+1} < \mu_{m+1}$, 从而$\mu$所在的位置有两种可能性:

$$\lambda_m < \mu_m < \mu \leqslant \lambda_{m+1} \text{ 或 } \lambda_{m+1} < \mu \leqslant \mu_{m+1}$$

- 注意到

$$p_\ell(\mu) = \prod_{i=1}^{\ell}(\mu_i - \mu), p_{\ell+1} = \prod_{i=1}^{\ell+1}(\lambda_i - \mu)$$

$\lambda_m < \mu_m < \mu \leqslant \lambda_{m+1}$时

- 当$\lambda_m < \mu_m < \mu \leqslant \lambda_{m+1}$时，可知$p_\ell(\mu)$与$p_{\ell+1}(\mu)$同号，即使$\mu = \lambda_{m+1}$按规定此两数也是同号的

$\lambda_m < \mu_m < \mu \leqslant \lambda_{m+1}$时

- 当$\lambda_m < \mu_m < \mu \leqslant \lambda_{m+1}$时，可知$p_\ell(\mu)$与$p_{\ell+1}(\mu)$同号，即使$\mu = \lambda_{m+1}$按规定此两数也是同号的
- 从而$s_{\ell+1}(\mu) = s_\ell(\mu) = m$, 这正好是$p_{\ell+1}(\lambda)$在区间$(-\infty, \mu)$内根的个数

$\lambda_{m+1} < \mu \leqslant \mu_{m+1}$时

当$\lambda_{m+1} < \mu \leqslant \mu_{m+1}$时，我们分两种情况证明$s_{\ell+1}(\mu) = m + 1$

- 若$\mu < \mu_{m+1}$, 则$p_\ell(\mu)$与$p_{\ell+1}(\mu)$异号，因而$s_{\ell+1}(\mu) = s_\ell(\mu) + 1 = m + 1$

$\lambda_{m+1} < \mu \leqslant \mu_{m+1}$时

当$\lambda_{m+1} < \mu \leqslant \mu_{m+1}$时，我们分两种情况证明$s_{\ell+1}(\mu) = m+1$

- 若$\mu < \mu_{m+1}$, 则$p_\ell(\mu)$与$p_{\ell+1}(\mu)$异号，因而$s_{\ell+1}(\mu) = s_\ell(\mu) + 1 = m + 1$
- 若$\mu = \mu_{m+1}$, 则此时有$p_\ell(\mu) = 0$, 按约定$p_\ell(\mu)$与$p_{\ell-1}(\mu)$ 同号。由性质3可知，$p_{\ell-1}(\mu)$与$p_{\ell+1}(\mu)$异号，因而$p_{\ell+1}(\mu)$ 与$p_\ell(\mu)$异号，从而$s_{\ell+1}(\mu) = s_\ell(\mu) + 1 = m + 1$

$\lambda_{m+1} < \mu \leqslant \mu_{m+1}$时

当$\lambda_{m+1} < \mu \leqslant \mu_{m+1}$时，我们分两种情况证明$s_{\ell+1}(\mu) = m+1$

- 若$\mu < \mu_{m+1}$, 则$p_\ell(\mu)$与$p_{\ell+1}(\mu)$异号，因而$s_{\ell+1}(\mu) = s_\ell(\mu) + 1 = m + 1$
- 若$\mu = \mu_{m+1}$, 则此时有$p_\ell(\mu) = 0$, 按约定$p_\ell(\mu)$与$p_{\ell-1}(\mu)$ 同号。由性质3可知，$p_{\ell-1}(\mu)$与$p_{\ell+1}(\mu)$异号，因而$p_{\ell+1}(\mu)$ 与$p_\ell(\mu)$异号，从而$s_{\ell+1}(\mu) = s_\ell(\mu) + 1 = m + 1$
- 根据归纳假设，这就完成了证明

求指定特征值

- 利用定理的推论，我们可以用二分法求T的任何一个指定的特征值

求指定特征值

- 利用定理的推论，我们可以用二分法求T的任何一个指定的特征值
- 设T的特征值为$\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_n$

求指定特征值

- 利用定理的推论，我们可以用二分法求T的任何一个指定的特征值
- 设T的特征值为$\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_n$
- 则必有$|\lambda_i| \leqslant \rho(T) \leqslant \|T\|_\infty$

求指定特征值

- 利用定理的推论，我们可以用二分法求T的任何一个指定的特征值
- 设T的特征值为$\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_n$
- 则必有$|\lambda_i| \leqslant \rho(T) \leqslant \|T\|_\infty$
- 假定我们期望求T的第m个特征值λ_m，我们先取

$$\ell_0 = -\|T\|_\infty, u_0 = \|T\|_\infty$$

二分法

- 根据设定，λ_m必在区间$[\ell_0, u_0]$内

二分法

- 根据设定，λ_m必在区间$[\ell_0, u_0]$内
- 取$[\ell_0, u_0]$的中点$r_1 = (\ell_0 + u_0)/2$, 计算$s_n(r_1)$

二分法

- 根据设定，λ_m必在区间$[\ell_0, u_0]$内
- 取$[\ell_0, u_0]$的中点$r_1 = (\ell_0 + u_0)/2$, 计算$s_n(r_1)$
  - 若$s_n(r_1) \geqslant m$, 则$\lambda \in [\ell_0, r_1]$, 于是取$\ell_1 = \ell_0$, $u_1 = r_1$

二分法

- 根据设定，λ_m必在区间$[\ell_0, u_0]$内
- 取$[\ell_0, u_0]$的中点$r_1 = (\ell_0 + u_0)/2$，计算$s_n(r_1)$
  - 若$s_n(r_1) \geqslant m$，则$\lambda \in [\ell_0, r_1]$，于是取$\ell_1 = \ell_0$，$u_1 = r_1$
  - 否则$\lambda \in [r_1, u_0]$，于是取$\ell_1 = r_1$，$u_1 = u_0$

二分法

- 根据设定，λ_m必在区间$[\ell_0, u_0]$内
- 取$[\ell_0, u_0]$的中点$r_1 = (\ell_0 + u_0)/2$, 计算$s_n(r_1)$
  - 若$s_n(r_1) \geqslant m$, 则$\lambda \in [\ell_0, r_1]$, 于是取$\ell_1 = \ell_0$, $u_1 = r_1$
  - 否则$\lambda \in [r_1, u_0]$, 于是取$\ell_1 = r_1$, $u_1 = u_0$
  - 如此我们得到一个长度减少一半的区间$[\ell_1, u_1]$仍包含特征值λ_m

二分法

- 根据设定，λ_m必在区间$[\ell_0, u_0]$内
- 取$[\ell_0, u_0]$的中点$r_1 = (\ell_0 + u_0)/2$，计算$s_n(r_1)$
  - 若$s_n(r_1) \geqslant m$，则$\lambda \in [\ell_0, r_1]$，于是取$\ell_1 = \ell_0$，$u_1 = r_1$
  - 否则$\lambda \in [r_1, u_0]$，于是取$\ell_1 = r_1$，$u_1 = u_0$
  - 如此我们得到一个长度减少一半的区间$[\ell_1, u_1]$仍包含特征值λ_m
- 继续上述过程直到区间长度足够小，最后取区间中点作为λ_m的近似值

变号数的有效计算

- 二分法的主要工作是计算$s_n(\mu)$. 这显然不能直接通过计算$p_i(\mu)$的值来实现，因为高阶多项式的计算很容易出现不稳定

变号数的有效计算

- 二分法的主要工作是计算$s_n(\mu)$. 这显然不能直接通过计算$p_i(\mu)$的值来实现，因为高阶多项式的计算很容易出现不稳定
- 定义$q_i(\lambda) = \dfrac{p_i(\lambda)}{p_{i-1}(\lambda)}$, $i = 1, 2, \ldots, n$

变号数的有效计算

- 二分法的主要工作是计算$s_n(\mu)$. 这显然不能直接通过计算$p_i(\mu)$的值来实现，因为高阶多项式的计算很容易出现不稳定
- 定义$q_i(\lambda) = \dfrac{p_i(\lambda)}{p_{i-1}(\lambda)}$, $i = 1, 2, \ldots, n$
- 根据定义可知

$$q_1(\lambda) = p_1(\lambda) = \alpha_1 - \lambda$$

$$q_i(\lambda) = \alpha_i - \lambda - \frac{\beta_i^2}{q_{i-1}(\lambda)}, i = 2, \ldots, n$$

变号数的有效计算

- 二分法的主要工作是计算$s_n(\mu)$. 这显然不能直接通过计算$p_i(\mu)$的值来实现，因为高阶多项式的计算很容易出现不稳定
- 定义$q_i(\lambda) = \dfrac{p_i(\lambda)}{p_{i-1}(\lambda)}$, $i = 1, 2, \ldots, n$
- 根据定义可知

$$q_1(\lambda) = p_1(\lambda) = \alpha_1 - \lambda$$

$$q_i(\lambda) = \alpha_i - \lambda - \frac{\beta_i^2}{q_{i-1}(\lambda)}, i = 2, \ldots, n$$

- $s_n(\mu)$就是数列$q_1(\mu), \ldots, q_n(\mu)$中负数的个数

$q_{i-1}(\lambda) = 0$的处理

- 当$q_{i-1}(\lambda) = 0$时，按规定此时q_{i-1}应按正数对待

$q_{i-1}(\lambda) = 0$的处理

- 当$q_{i-1}(\lambda) = 0$时，按规定此时q_{i-1}应按正数对待
- 在算法中可用很小的正数代替$q_{i-1}(\lambda)$

运算量

- 可以事先把β_i^2算好并贮存起来，因此上述变号数计算的算法只需要$n-1$次除法运算和$2n-1$次加减运算

运算量

- 可以事先把β_i^2算好并贮存起来，因此上述变号数计算的算法只需要$n-1$次除法运算和$2n-1$次加减运算
- 如果计算一个特征值平均需要m次二分法，则用二分法求一个特征值的运算量平均为$3nm$

注解

- 二分法具有较大的灵活性，它既可以求某些指定的特征值，也可以求某个区间内的特征值，而且对各个特征值的精度要求也可以不一样

注解

- 二分法具有较大的灵活性，它既可以求某些指定的特征值，也可以求某个区间内的特征值，而且对各个特征值的精度要求也可以不一样
- 二分法是非常稳定的，而且计算精度和所需计算时间与特征值的分离程度无关

注解

- 二分法具有较大的灵活性，它既可以求某些指定的特征值，也可以求某个区间内的特征值，而且对各个特征值的精度要求也可以不一样
- 二分法是非常稳定的，而且计算精度和所需计算时间与特征值的分离程度无关
- 在算出某个特征值之后，可以应用反幂法求特征向量

复习：SVD分解定理

- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 则存在正交矩阵$U \in \mathbb{R}^{m\times m}$和$V \in \mathbb{R}^{n\times n}$使得
$$U^TAV = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$
其中$\Sigma_r = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$, $\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0$

复习：SVD分解定理

- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 则存在正交矩阵$U \in \mathbb{R}^{m\times m}$和$V \in \mathbb{R}^{n\times n}$使得

$$U^TAV = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

其中$\Sigma_r = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$, $\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0$

- 对于上述分解，我们称

$$\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n = 0$$

为A的奇异值；U和V的列向量分别称为A的左/右奇异向量

奇异值分解的计算

- 对给定的$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geqslant n)$，如何计算其奇异值分解，这是一个有重要应用意义的问题

奇异值分解的计算

- 对给定的$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geqslant n)$，如何计算其奇异值分解，这是一个有重要应用意义的问题
- 奇异值分解与对称矩阵的谱分解密切相关，从而也相应地有计算奇异值分解的QR方法、Jacobi方法、二分法等

奇异值分解的计算

- 对给定的$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geqslant n)$，如何计算其奇异值分解，这是一个有重要应用意义的问题
- 奇异值分解与对称矩阵的谱分解密切相关，从而也相应地有计算奇异值分解的QR方法、Jacobi方法、二分法等
- 本节我们只介绍计算奇异值分解的QR方法，基本想法：隐含地应用对称QR方法于A^TA上，但又希望在整个过程中并不直接计算A^TA

二对角化

- 对应于将A^TA三对角化，这里我们是将A二对角化，即计算两个正交矩阵U, V, 使得

$$U^TAV = \begin{pmatrix} B \\ 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \delta_1 & \gamma_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \gamma_{n-1} \\ & & & \delta_n \end{pmatrix}$$

二对角化

- 对应于将A^TA三对角化，这里我们是将A二对角化，即计算两个正交矩阵U, V, 使得

$$U^TAV = \begin{pmatrix} B \\ 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \delta_1 & \gamma_1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \gamma_{n-1} \\ & & & \delta_n \end{pmatrix}$$

- 从而有$V^TA^TAV = B^TB$是一个对称三对角阵，这就相当于把A^TA三对角化

二对角化的实现

- 二对角分解可以利用Householder变换实现

二对角化的实现

- 二对角分解可以利用Householder变换实现
- 首先确定一个m阶Householder变换P_1，把$P_1^T A$的第一列除首元外化为零

二对角化的实现

- 二对角分解可以利用Householder变换实现
- 首先确定一个m阶Householder变换P_1，把$P_1^T A$的第一列除首元外化为零
- 然后确定$n-1$阶Householder变换H_1使得

$$P_1^T A \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_1 \end{pmatrix}$$

的第一行除前两个元素外其余元素约化为零

二对角化的实现

- 二对角分解可以利用Householder变换实现
- 首先确定一个m阶Householder变换P_1，把$P_1^T A$的第一列除首元外化为零
- 然后确定$n-1$阶Householder变换H_1使得

$$P_1^T A \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_1 \end{pmatrix}$$

的第一行除前两个元素外其余元素约化为零

- 如此继续下去就可以完成二对角分解

SVD迭代：位移的选取

- 下面对三对角阵$T = B^T B$进行带位移的隐式QR迭代。同样这里的关键是不明确把T计算出来

SVD迭代：位移的选取

- 下面对三对角阵$T=B^TB$进行带位移的隐式QR迭代。同样这里的关键是不明确把T计算出来
- 位移的选取：针对T的右下角2阶矩阵

$$\begin{pmatrix} \delta_{n-1}^2+\gamma_{n-1}^2 & \delta_{n-1}\gamma_{n-1} \\ \delta_{n-1}\gamma_{n-1} & \delta_n^2+\gamma_{n-1}^2 \end{pmatrix}$$

我们取位移μ为这个矩阵的两个特征值中距离$\delta_n^2+\gamma_{n-1}^2$近的那个（即Wilkinson位移）

SVD迭代：c, s的确定

- 接下来，确定Givens变换$G_1 = G(1, 2, \theta)$满足

$$\begin{pmatrix} c_1 & s_1 \\ -s_1 & c_1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \delta_1^2 - \mu \\ \delta_1 \gamma_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix}$$

这里$T - \mu I$的第一列是$(\delta_1^2 - \mu, \delta_1 \gamma_1, 0, \ldots, 0)^T$

SVD迭代：正交相似变换

- 最后一步就是确定正交矩阵Q使得$Q^T(G_1^T T G_1)Q$是对称三对角阵，且$Qe_1 = e_1$

SVD迭代：正交相似变换

- 最后一步就是确定正交矩阵Q使得$Q^T(G_1^T TG_1)Q$是对称三对角阵，且$Qe_1 = e_1$
- 为了避免T的计算，只需计算正交矩阵P和Q使得$P^T(BG_1)Q$是二对角阵，且$Qe_1 = e_1$

SVD迭代：正交相似变换

- 最后一步就是确定正交矩阵Q使得$Q^T(G_1^T TG_1)Q$是对称三对角阵，且$Qe_1 = e_1$
- 为了避免T的计算，只需计算正交矩阵P和Q使得$P^T(BG_1)Q$是二对角阵，且$Qe_1 = e_1$
- 可以利用Givens变换实现这一点

不可约的要求

- 隐式QR迭代的前提是$T = B^T B$是不可约的

不可约的要求

- 隐式QR迭代的前提是$T = B^T B$是不可约的
- T的次对角元为$\delta_j \gamma_j$, 因此T不可约的充要条件是$\delta_j \gamma_j \neq 0$

不可约的要求

- 隐式QR迭代的前提是$T = B^T B$是不可约的
- T的次对角元为$\delta_j \gamma_j$, 因此T不可约的充要条件是$\delta_j \gamma_j \neq 0$
- 当某个$\gamma_j = 0$时，这时可以把问题分解为两个低阶问题处理

不可约的要求

- 隐式QR迭代的前提是$T = B^TB$是不可约的
- T的次对角元为$\delta_j\gamma_j$, 因此T不可约的充要条件是$\delta_j\gamma_j \neq 0$
- 当某个$\gamma_j = 0$时，这时可以把问题分解为两个低阶问题处理
- 当某个$\delta_j = 0$，而$\gamma_j \neq 0$时，我们可以通过适当的Givens变换把B的第j行元素都变零，而保持其二对角形式不变；从而实现降阶

SVD算法

- 在实际计算时，当δ_j或γ_j很小时，我们就可以把B分解为两个低阶的二对角阵

SVD算法

- 在实际计算时，当δ_j或γ_j很小时，我们就可以把B分解为两个低阶的二对角阵
- 通常使用的准则是：如果

$$|\delta_j| \leqslant \varepsilon \|B\|_\infty \text{ 或 } |\gamma_j| \leqslant (|\delta_j| + |\delta_{j+1}|)$$

就将δ_j或γ_j视为零，其中ε是一个略大于机器精度的正数

SVD算法

- 在实际计算时，当δ_j或γ_j很小时，我们就可以把B分解为两个低阶的二对角阵
- 通常使用的准则是：如果

$$|\delta_j| \leqslant \varepsilon \|B\|_\infty \text{ 或 } |\gamma_j| \leqslant (|\delta_j| + |\delta_{j+1}|)$$

就将δ_j或γ_j视为零，其中ε是一个略大于机器精度的正数

- 将这一准则与前述算法结合，就得到了SVD算法

SVD算法

- 在实际计算时，当δ_j或γ_j很小时，我们就可以把B分解为两个低阶的二对角阵
- 通常使用的准则是：如果

$$|\delta_j| \leqslant \varepsilon \|B\|_\infty \text{ 或 } |\gamma_j| \leqslant (|\delta_j| + |\delta_{j+1}|)$$

  就将δ_j或γ_j视为零，其中ε是一个略大于机器精度的正数
- 将这一准则与前述算法结合，就得到了SVD算法
- 算法的渐近收敛速度是三次的