第0章 预备知识

如果你对矩阵（尤其是三对角矩阵和海森伯格矩阵）的 QR、特征和舒尔分解熟悉，或你不关心这些与克雷洛夫子空间关系不大的算法的话，可以略过本章第 1 节以外的几节。

第1节 记号

§1 标量、向量和矩阵

集合用大写花体字母表示，如$\mathcal{L}$。

标量用斜体小写希腊字母表示，如α。其模长记为$|\alpha|$；若α为一实数，则模长就是其绝对值；若α为一复数，则模长就是其在复空间上的长度。

向量用带箭头的斜体小写英文或希腊字母表示，如$\vec{x}$；其元素用不带箭头的斜体小写英文字母以及一个下标表示，如x_i；我们说$\vec{x} \in \mathbb{F}^m$等价于$\vec{x}$具有m个元素：

$$\vec{x} \in \mathbb{F}^m \Leftrightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}; \quad x_1, \dots, x_m \in \mathbb{F}$$

矩阵用大写斜体英文或希腊字母表示，如A、Λ；其元素用对应的斜体小写字母以及下标表示，如$a_{i,j}$；我们说$A \in \mathbb{F}^{m\times n}$等价于$A$具有$m$行$n$列：

$$A \in \mathbb{F}^{m\times n} \Leftrightarrow A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & \cdots & a_{m,n} \end{bmatrix}; \quad a_{1,1}, \dots, a_{m,n} \in \mathbb{F}$$

矩阵的部分矩阵/子矩阵记为$A_{i_1:i_2,j_1:j_2}$，意义是取矩阵A的第i_1到i_2行、第j_1到j_2列（均包含i_2、j_2）组成的新的矩阵。

标量、向量和矩阵的按元素共轭分别记为$\bar{\alpha}$、$\bar{\vec{x}}$和$\bar{A}$。向量和矩阵的转置共轭则使用$\vec{x}^*$和A^*，若$A = A^*$则我们说矩阵A厄米。

例如，$\vec{x} \in \mathbb{R}^3$对应的向量可以是

$$\vec{x} = [0,1,2]^T$$

$A \in \mathbb{C}^{2\times 3}$对应的矩阵可以是

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \mathrm{i} \\ -1+2\mathrm{i} & -\mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}$$

矩阵A的对角线是$\{a_{i,i}\}$所组成的向量，记作$\operatorname{diag} A$；其k-对角线是$\{a_{i,i+k}\}$所组成的向量，记作$\operatorname{diag}_k A$。diag 也会反过来使用，表示对角矩阵。

上面例子中矩阵A的对角线和 1-对角线就是

$$\operatorname{diag} A = [0, -\mathrm{i}]^T, \qquad \operatorname{diag}_{-1} A = [1,0]^T$$

同样地

$$\operatorname{diag}\{1,2,3\} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

§2 内积与模长

将两个均属于$\mathbb{F}^m$的向量$\vec{x}$、$\vec{y}$的内积记为$\langle\vec{x},\vec{y}\rangle$：

$$\langle\vec{x},\vec{y}\rangle := \sum_{i=1}^{n}\bar{x}_i y_i$$

不难发现，$\langle\vec{x},\vec{y}\rangle = \vec{x}^*\vec{y}$。

将向量$\vec{x}$的模长记为$\|\vec{x}\|$：

$$\|\vec{x}\| := \sqrt{\langle\vec{x},\vec{x}\rangle}$$

向量$\vec{x} = [\mathrm{i}, 1+\mathrm{i}, -1]^T$和$\vec{y} = [1,2,3]^T$的内积就是

$$\langle\vec{x},\vec{y}\rangle = -\mathrm{i} + 2(1-\mathrm{i}) - 3 = -1-3\mathrm{i}$$

而向量$\vec{x}$的模长就是$\|\vec{x}\| = \sqrt{1+2+1} = 2$。若$\|\vec{x}\| = 1$，我们说向量$\vec{x}$是一个**单位向量**（unit vector），如$\vec{x} = \frac{1}{2}[\mathrm{i}, 1+\mathrm{i}, -1]^T$就是一个单位向量。

将矩阵A的模定义为

$$\|A\| = \max_{\|\vec{x}\|=1}\|A\vec{x}\|$$

不难证明，$\|A\|$就是A的特征值中模最大的那个的模：只需将$\vec{x}$用特征向量分解。

例如，矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -3 & 0 \\ 4 & 2 & 0 \\ -5 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

的模为$\|A\| = \left|2+2\sqrt{3}\mathrm{i}\right| = 4$。

§3 特征分解

矩阵$A \in \mathbb{F}^{m\times m}$的特征分解是所有符合

$$A\vec{u} = \lambda\vec{u}$$

的特征值λ_i和单位特征向量$\vec{u}_i$分别组成的对角矩阵$\Lambda = \mathrm{diag}\{\lambda_1,\dots,\lambda_m\}$和列向量矩阵$U = [\vec{u}_i,\dots,\vec{u}_m]$，这二者符合

$$A = U\Lambda U^{-1}$$

对于厄米矩阵来说，你应该在线性代数课程中证明过$U^{-1} = U^*$，也即U是**酉矩阵**（unitary matrix）。当然，对于非厄米矩阵A，可能存在$\vec{v}^*A = \lambda\vec{v}^*$且$\vec{v} \neq \vec{u}$的特征向量，一般称列向量矩阵$V = [\vec{v}_i,\dots,\vec{v}_m]$为左特征向量，而称$U$为右特征向量。在这个讲义中，一般不会涉及左特征向量的问题：若你需要左特征向量而非右特征向量或线性系统$\vec{x}^*A = \vec{b}^*$的解，只需将A转置共轭即可。

例如，厄米矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1-\mathrm{i} & 2\mathrm{i} \\ 1+\mathrm{i} & 2 & 1+\mathrm{i} \\ -2\mathrm{i} & 1-\mathrm{i} & 3 \end{bmatrix}$$

的特征值和特征向量分别为

$$\Lambda = \mathrm{diag}\begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix};\quad U = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}}(1+3\mathrm{i}) & -\sqrt{2} & \sqrt{-4-3\mathrm{i}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}}(1+3\mathrm{i}) & \sqrt{-4-3\mathrm{i}} & -\sqrt{2} \\ \sqrt{5} & \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{bmatrix}$$

非厄米实矩阵

$$A=\begin{bmatrix}2 & -3 & 0\\ 4 & 2 & 0\\ -5 & 0 & 4\end{bmatrix}$$

的特征值和特征向量分别为

$$\Lambda=\operatorname{diag}\begin{bmatrix}4\\ 2+2\sqrt{3}\mathrm{i}\\ 2-2\sqrt{3}\mathrm{i}\end{bmatrix};\quad U=\frac{1}{\sqrt{187}}\begin{bmatrix}0 & 0 & 1\\ 2(\sqrt{3}-3\mathrm{i}) & -4(\sqrt{3}+\mathrm{i}) & 5\sqrt{3}\\ 2(\sqrt{3}+3\mathrm{i}) & -4(\sqrt{3}-\mathrm{i}) & 5\sqrt{3}\end{bmatrix}$$

不难看出，即便是只有实数，非厄米的实矩阵也有可能具有复特征值和特征向量，但是必然是成对出现的互为共轭的值。利用实系数特征方程$\det(xI-A)=0$的共轭复数根定理，我们可以直接证明这个结论，这里不再赘述。

矩阵或线性映射A的**零空间/核**（null space / kernel）指的是令$A\vec{x}=\vec{0}$的所有向量$\vec{x}$所张成的空间，它也是A的所有特征值为 0 的（右）特征向量所张成的空间。

§4 迭代标记

一般将迭代次数记号写到下标，不加括号，如$\vec{q}_n$；有时因为下标要留给对应元素或子矩阵、子向量标记，该记号要放到上标并加入括号用以区分幂，如$\vec{q}^{(n)}$。

第2节 QR 分解

§1 定义

QR 分解（QR factorization）指的是将一般矩阵$A\in\mathbb{F}^{m\times n}$（通常是$m\geq n$）分解为一个酉矩阵$Q$和一个上三角矩阵$R$的乘积；其中 R 是 right 的缩写，指的是三角矩阵的右半部分非零。QR 分解的目的和高斯消元一致，都是要把一个普通的矩阵变成一个（上）三角矩阵，只不过这里，上三角矩阵还原为原先矩阵需要乘以的不再是一系列的初等行/列变换矩阵的积，而是一个酉矩阵Q。

QR 分解最简单的方法就是对要分解的矩阵A的列向量$\{\vec{a}_1,\dots,\vec{a}_n\}$做**施密特正交化**（Schmidt orthogonalization）：

$$\begin{cases}\vec{q}_1=\dfrac{\vec{a}_1}{\|\vec{a}_1\|}=\tau_{1,1}\vec{a}_1\\ \vec{q}_2=\dfrac{\vec{a}_2-\vec{q}_1\langle\vec{a}_2,\vec{q}_1\rangle}{\|\vec{a}_2-\vec{q}_1\langle\vec{a}_2,\vec{q}_1\rangle\|}=\tau_{1,2}\vec{a}_1+\tau_{2,2}\vec{a}_2\\ \qquad\qquad\vdots\\ \vec{q}_n=\dfrac{\vec{a}_n-\sum_{i=1}^{n-1}\vec{q}_i\langle\vec{a}_i,\vec{q}_i\rangle}{\|\vec{a}_n-\sum_{i=1}^{n-1}\vec{q}_i\langle\vec{a}_i,\vec{q}_i\rangle\|}=\tau_{1,n}\vec{a}_1+\cdots+\tau_{n,n}\vec{a}_n\end{cases}$$

也即

$$[\vec{q}_1,\dots,\vec{q}_n]=[\vec{a}_1,\dots,\vec{a}_n]\begin{bmatrix}\tau_{1,1} & \tau_{1,2} & \cdots & \tau_{1,n}\\ & \tau_{2,2} & \cdots & \tau_{2,n}\\ & & \ddots & \vdots\\ & & & \tau_{n,n}\end{bmatrix}\Leftrightarrow Q=AR^{-1}$$

例如，矩阵

$$A=\begin{bmatrix}0.13909 & 0.577394 & 0.867797\\ 0.276491 & 0.00213917 & 0.691662\\ 0.193597 & 0.349887 & 0.798548\end{bmatrix}$$

的施密特正交化 QR 结果是

$$Q=\begin{bmatrix}0.381 & 0.784086 & 0.489948\\ 0.757373 & -0.568619 & 0.321028\\ 0.530307 & 0.248762 & -0.810489\end{bmatrix}$$
$$R^{-1}=\begin{bmatrix}2.73924 & -2.07092 & -690323\\ 0 & 1.85684 & -249615\\ 0 & 0 & 276728\end{bmatrix}$$
$$R=\begin{bmatrix}0.365065 & 0.407155 & 1.27795\\ 0 & 0.538549 & 0.485784\\ 0 & 0 & 3.61366\times 10^{-6}\end{bmatrix}$$

可以看到，施密特正交化的手段计算量比较大，且对类似上例的病态矩阵来说，由于R^{-1}的不同列之间的巨大差异，求逆的过程会引入过多数值误差。所以我们一般采用的是另一种方法——**豪斯霍尔德反射变换**（Householder reflection）。

§2 豪斯霍尔德 QR 分解

豪斯霍尔德 QR 分解是一种利用豪斯霍尔德反射变换

$$H=I-2\vec{v}\vec{v}^*$$

直接得到上三角矩阵的 QR 分解，其中$\|\vec{v}\|=1$。

观察豪斯霍尔德反射变换与原矩阵的乘积

$$HA=A-\frac{1}{\gamma}\vec{v}\vec{v}^*A=\begin{bmatrix}a_{1,1}-v_1\langle\vec{v},\vec{a}_1\rangle/\gamma & \cdots & \times\\ a_{2,1}-v_2\langle\vec{v},\vec{a}_1\rangle/\gamma & \cdots & \times\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{m,1}-v_m\langle\vec{v},\vec{a}_1\rangle/\gamma & \cdots & \times\end{bmatrix}$$

此处我未单位化$\vec{v}$，因此引入了单位化系数γ。想要使得新的$a_{2,1},\dots,a_{m,1}$均变为0，需要

$$\begin{cases}\langle\vec{v},\vec{a}_1\rangle=\gamma/\alpha\\ v_1\neq\alpha a_{1,1}\\ v_2=\alpha a_{2,1},v_3=\alpha a_{3,1},\dots\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\vec{v}=[a_{1,1}\pm\|\vec{a}_1\|,a_{2,1},\dots]^T\\ \gamma=\|\vec{a}_1\|^2+\|\vec{a}_1\||a_{1,1}|\end{cases}$$

同时，为了保证后续反射变换不破坏这些变为 0 的值，后续所有$\vec{v}$的第一个元素都要是 0。根据数学归纳，不难发现，第k次迭代时，$\vec{v}_k$的前$(k-1)$个元素均为0。利用一系列这样的反射变换，我们就可以把A的非三角的部分的列向量映射到单位向量上去，也即存在$H_1,H_2,\dots,H_n$使得：

$$\begin{bmatrix}R\\ O\end{bmatrix}=H_n\cdots H_2H_1A:=Q^*A$$

对于上例的矩阵，$\vec{v}_1$应该取为

$$[0.13909+0.365065,0.276491,0.193597]^T$$

的单位化结果，此时，

$$H_1A=(I-2\vec{v}_1\vec{v}_1^T)A=\begin{bmatrix}-0.365065 & -0.407155 & -1.27795\\ 0 & -0.537811 & -0.485118\\ 0 & -0.0281816 & -0.0254241\end{bmatrix}$$

刚好将A的第一列变换为需要的上三角形式。

$\vec{v}_2$应该取为$[-0.537811-0.538549,-0.0281816]^T$的单位化结果，以此类推。最后，

$$R=H_3H_2H_1A=\begin{bmatrix}-0.365065 & -0.407155 & -1.27795\\ 0 & 0.538549 & 0.485784\\ 0 & 0 & -3.61366\times 10^{-6}\end{bmatrix}$$

直接得到了施密特正交化 QR 求逆之后才能得到的上三角矩阵（仅列的正负号有区别）。

最后，你可能还有疑问：$Q = H_1 H_2 \cdots H_n$是一个酉矩阵吗？根据H的定义$H = I - 2\vec{v}\vec{v}^*$，不难看出，$H$是对称、自反的酉矩阵，所以它们的乘积当然也是酉矩阵。同时豪斯霍尔德反射变换与向量的乘积是非常好计算的，只需要 3 倍向量元素个数次浮点运算：

$$H\vec{x} = \vec{x} - 2\vec{v}(\vec{v}^*\vec{x})$$

这样一来，我们就得到了时间复杂度为$\Theta(mn^2)$的豪斯霍尔德 QR 分解算法：

输入：待分解矩阵$A \in \mathbb{F}^{m\times n}$（$m \geq n$）
输出：分解结果矩阵$Q \in \mathbb{F}^{m\times m}$、$R \in \mathbb{F}^{n\times n}$
For $k = 1, \dots, n$ **Do**
  $\vec{y} \leftarrow A_{k:m,k}$
  $\vec{w} \leftarrow \vec{y} + \operatorname{sign}(y_1)\,\|\vec{y}\|\vec{e}_1$
  $\vec{v}_k \leftarrow \vec{w}/\|\vec{w}\|$
  $A_{k:m,k:n} \leftarrow A_{k:m,k:n} - 2\vec{v}_k(\vec{v}_k^* A_{k:m,k:n})$
End For
Return $R \equiv A_{1:n,1:n}$
Return $Q \equiv \prod_{k=1}^{n}\left(I - 2\begin{bmatrix}\vec{0}_k \\ \vec{v}_k\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\vec{0}_k \\ \vec{v}_k\end{bmatrix}^T\right)$ /*$\vec{0}_k = \underbrace{[0,\dots,0]}_{k-1\text{ 个 }0}{}^T$*/

算法 1 豪斯霍尔德 QR 分解

在实际使用过程中，一般不必要显式储存Q：将$\vec{v}_k$存储于A的下三角部分并额外利用长度为n的向量存储A的实际对角元（或反过来存储$\vec{v}_k$的第一个元素）。之后若需要计算Q、Q^*与其他矩阵的乘法，可以直接利用$Q = H_1 H_2 \cdots H_n$从A中提取$\vec{v}_k$依次计算。这也是 LAPACK 的 QR 分解相关 API 的思路。

§3 特殊矩阵的 QR 分解

三对角矩阵（tridiagonal matrix）指的是形如

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \gamma_2 & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \gamma_{n-1} \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix} \in \mathbb{F}^{n\times n}$$

的矩阵。不难发现，由于下半矩阵只存在−1-对角元，因此$\vec{v}_1$仅有 2 个元素，所以当β_1被$H_1 = I - 2\vec{v}_1\vec{v}_1^T$变为 0 时，$\beta_2$不会被影响；以此类推，$\vec{v}_k$都有且仅有 2 个元素。又因为上半矩阵只存在 1-对角元，每次计算$H_k A$就只需要更新常数个元素。因此三对角矩阵整个 QR 的时间复杂度是$\Theta(n)$。

海森伯格矩阵（Hessenberg matrix）指的是形如

$$A = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \cdots & a_{1,n} \\ \beta_1 & a_{2,2} & a_{2,3} & \cdots & a_{2,n} \\ & \beta_2 & a_{3,3} & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & a_{n-1,n} \\ & & & \beta_{n-1} & a_{n,n} \end{bmatrix} \in \mathbb{F}^{n\times n}$$

的矩阵。同上，$\vec{v}_k$都有且仅有 2 个元素；又因为上半矩阵（可能）是非零的，因

此每次计算H_kA需要更新第k和$k+1$行/列的元素，故海森伯格矩阵整个 QR 的时间复杂度是$\Theta(n^2)$。

以此类推，若一个矩阵的下半矩阵最多存在$-\nu$-对角元非零且上半矩阵是非零,则它整个 QR 的时间复杂度是$\Theta(\nu^2n^2)$;若它的上半矩阵最多ν-对角元非零，则整个 QR 的时间复杂度是$\Theta(\nu^2n)$。

第3节 实对称三对角矩阵的特征分解

实对称三对角矩阵（real symmetric tridiagonal matrix）指的是形如

$$A=\begin{bmatrix}\alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n\end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{n\times n}$$

的矩阵，其中$\beta_i\neq 0$（否则A就可以分解为三个或以上的分块对角矩阵）。

由于 QR 或下文将要介绍的兰乔斯迭代等方法可以将一个厄米矩阵正交变换为一个实对称三对角矩阵，我们可以不失一般性地设$A\in\mathbb{F}^{n\times n}$是一个实对称三对角矩阵，只需要实现它的特征分解即可。

注意到三对角矩阵做 QR 分解时，每次的$\vec{v}_k$有且仅有两个元素非零，即

$$\left[\alpha_k\pm\sqrt{\alpha_k^2+\beta_k^2},\quad \beta_k\right];\quad \gamma=\alpha_k^2+\beta_k^2+|\alpha_k|\sqrt{\alpha_k^2+\beta_k^2}$$

故R矩阵仍旧是带状的，而我们已经知道这样的整个 QR 分解的复杂度是$\Theta(n)$，远小于一般矩阵的$\Theta(n^3)$。那么 QR 分解对求解特征方程有什么作用呢?

注意到不仅仅是R矩阵具有特殊形式

$$\begin{bmatrix}\times & \times & \times & & \\ & \times & \times & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \times \\ & & & \times & \times \\ & & & & \times\end{bmatrix}$$

Q矩阵也具有特殊形式

$$\begin{bmatrix}\times & \times & \times & \cdots & \times \\ \times & \times & \times & \cdots & \times \\ & \times & \times & \cdots & \times \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & \times & \times\end{bmatrix}$$

也即实海森伯格矩阵。例如，矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 3 & 0 & 0\\ 3 & 4 & 5 & 0\\ 0 & 5 & 9 & 7\\ 0 & 0 & 7 & 16\end{bmatrix}$$

的 QR 分解结果为

$$Q=\begin{bmatrix}-0.316228 & 0.286039 & 0.467099 & 0.774597\\ -0.948683 & -0.0953463 & -0.1557 & -0.258199\\ 0 & 0.953463 & -0.1557 & -0.258199\\ 0 & 0 & -0.856349 & 0.516398\end{bmatrix}$$

$$R=\begin{bmatrix}-3.16228 & -4.74342 & -4.74342 & 0\\ 0 & 5.24404 & 8.10443 & 6.67424\\ 0 & 0 & -8.17424 & -14.7915\\ 0 & 0 & 0 & 6.45497\end{bmatrix}$$

而

$$RQ = \begin{bmatrix} 5.5 & -4.97494 & 0 & 0 \\ -4.97494 & 7.22727 & -7.79383 & 0 \\ 0 & -7.79383 & 13.9394 & -5.52771 \\ 0 & 0 & -5.52771 & 3.33333 \end{bmatrix}$$

也就是说$A' := RQ = Q^T AQ$仍旧是实对称三对角矩阵，不妨称这个正交相似变换为 QR 变换。为了了解它对求解特征方程的作用，我们需要知道如下定理：设符合上文的A的特征分解为$A = U^T \Lambda U$，则对于不动点迭代

$$A_k \to Q_k R_k, \qquad A_{k+1} \leftarrow Q_k^T A_k Q_k$$

来说，$\lim\limits_{k\to\infty} A_k = \Lambda$，因此$U = \prod_{k=1}^{\infty} Q_k$。该定理的证明较长，这里不多赘述，若你希望了解该证明，可参见数值分析课本如 (Stoer & Bulirsch, 1993)。

最简单的一种特征分解方法自然就是不断重复上述 QR 正交变换，但是若存在差距很小的相邻特征值，收敛速度可能会非常慢（参见为什么兰乔斯算法可以收敛），因此，我们实际中一般会使用特征值位移方法加速收敛：

$$A_k - s_k I \to Q_k R_k, \qquad A_{k+1} \leftarrow Q_k^T A_k Q_k + s_k I$$

例如，对矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 8.90947 & 1.68161 & 0 & 0 \\ 1.68161 & 9.03046 & 1.41927 & 0 \\ 0 & 1.41927 & 6.91227 & 4.06688 \\ 0 & 0 & 4.06688 & 2.16266 \end{bmatrix}$$

来说，我们知道它最大的特征值约为 11.1414。在经过 3 次不位移的 QR 变换后，

$$A_3 = \begin{bmatrix} 10.4038 & 1.19198 & 0 & 0 \\ 1.19198 & 8.70635 & 1.23694 & 0 \\ 0 & 1.23694 & 8.13356 & 0.000103396 \\ 0 & 0 & 0.000103396 & -0.228824 \end{bmatrix}$$

可以看到右下角的特征值并未完全收敛，若希望它收敛，则需要经过 7 次迭代；之后，若希望全部特征值收敛，则需要额外大约 100 次迭代。此时，

$$A_{110} \approx \operatorname{diag}\{11.1414, 9.12895, 6.97338, -0.228824\}$$

特征值是按照从大到小排序的。

但是若从头开始经过 3 次位移为 11.1 的 QR 变换

$$A_3' = \begin{bmatrix} 5.54795 & 2.90074 & 0 & 0 \\ 2.90074 & 1.27316 & 0.649228 & 0 \\ 0 & 0.649228 & 9.0524 & 0.0000399188 \\ 0 & 0 & 0.0000399188 & 11.1414 \end{bmatrix}$$

可以看到右下角的值已经非常接近 11.1414 且非对角元接近 0，代表这个值接近可以被分离为单独的分块对角矩阵，也就是说右下角的值接近收敛。

这也给我们提示了一个非常简单但是有效的收敛判据：若A_k的$|\beta_i| \ll |\alpha_i| + |\alpha_{i+1}|$，则可以将其划分为两个分块三对角矩阵；若进一步地有某个分块三对角矩阵大小为 1，则它就是收敛的特征值。

一般来讲，第k步的位移s_k取为A_k未收敛部分右下角2×2矩阵的特征值中更靠近α_{i+1}的那个（最优性并无证明），目的是为了令更靠近这个s_k的特征值先收敛，而这个特征值往往在右下角出现，见上面的例子。在迭代过程中，当A_k的右下角2×2矩阵的$|\beta_i| \ll |\alpha_i| + |\alpha_{i+1}|$，我们就认为这个特征值已经收敛。不断重复该过程，直到所有特征值都收敛，我们就得到了A的特征分解。

对与上例同样的矩阵A来说，其右下2×2矩阵的特征值中更靠近α_4的约为-0.172021，经过一次 QR 变换之后，我们得到了

$$A_1=\begin{bmatrix}9.5156 & 1.61262 & 0 & 0\\ 1.61262 & 8.82698 & 1.26542 & 0\\ 0 & 1.26542 & 8.90097 & 0.0340491\\ 0 & 0 & 0.0340491 & -0.228694\end{bmatrix}$$

其右下2×2矩阵的特征值中更靠近α_4的约为-0.228821，因此，

$$A_2=\begin{bmatrix}10.0168 & 1.43072 & 0 & 0\\ 1.43072 & 8.6946 & 1.27857 & 0\\ 0 & 1.27857 & 8.53231 & 9.94368\times 10^{-9}\\ 0 & 0 & 9.94368\times 10^{-9} & -0.228824\end{bmatrix}$$

可以看出，精度已经远超上例的A_3'；同理，

$$A_3=\begin{bmatrix}10.3834 & 1.2079 & 0 & 0\\ 1.2079 & 8.69909 & 1.2416 & 0\\ 0 & 1.2416 & 8.16118 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -0.228824\end{bmatrix}$$

其非对角元在机器精度上已经相对于-0.228824和8.16118为 0，也即特征值-0.228824收敛。接下来，我们分割矩阵，令$A\leftarrow A^{(3)}_{1:3,1:3}$，重复上述过程；这次，3 次迭代之后，

$$A_3=\begin{bmatrix}11.1281 & 0.162862 & 0\\ 0.162862 & 9.14221 & 0\\ 0 & 0 & 6.97338\end{bmatrix}$$

特征值 6.97338 收敛。最后，再分割一次矩阵并迭代 1 次，所有特征值都收敛了。

相信你也看出来了，利用位移的方法极大地加速了收敛，但是也带来了特征值无法天然排好序的问题；当然，我们可以通过同时交换特征值和特征向量解决这个问题，利用快速排序等方法，其平均时间复杂度为$O(n^2\log n)$。

当然，你也可能考虑到由于机器精度的限制，若s_k很大，A_k-s_kI可能会有精度损失，因此实际中一般使用隐式位移而非显式位移的方法。隐式位移的原理需要下属定理的证明：若A对称非奇异且$B=Q^TAQ$，其中Q为正交矩阵而B为非对角元均大于 0 的三对角矩阵，则Q的第一列完全确定了Q和B。该定理的证明不难，但是为了减轻你的负担，这里不再赘述，同样可参见数值分析课本如(Stoer & Bulirsch, 1993)。根据这个定理，我们需要Q_k的第一列能刚好是A_k-s_kI的 QR 分解的Q矩阵第一列；我们又知道 QR 分解时每次的$\vec{v}_i$有且仅有两个元素非零，因此Q矩阵第一列由且仅由$\vec{v}_1$决定，故Q_k和A_{k+1}就可以依次计算出来。

例如，对矩阵

$$A=\begin{bmatrix}5.93109 & 3.64299 & 0 & 0 & 0\\ 3.64299 & 3.46141 & 4.04806 & 0 & 0\\ 0 & 4.04806 & 7.23658 & 2.15139 & 0\\ 0 & 0 & 2.15139 & 7.57971 & 2.29058\\ 0 & 0 & 0 & 2.29058 & 1.52605\end{bmatrix}\equiv A_1$$

来说，我们可以确定$s_1\approx 0.757031$，则对A_1-s_1I进行 QR 的第一个豪斯霍尔德反射向量

$$\vec{v}_1^{(1)}=[0.953325,0.301945,0,0,0]^T$$

它对应的反射变换为$H_1^{(1)}=I-2\vec{v}_1^{(1)}\vec{v}_1^{(1)T}$，会将$A_1$变换为

$$H_1^{(1)}A_1H_1^{(1)}=\begin{bmatrix}8.54228 & -0.065616 & -2.33048 & 0 & 0\\ -0.065616 & 0.850224 & 3.30993 & 0 & 0\\ -2.33048 & 3.30993 & 7.23658 & 2.15139 & 0\\ 0 & 0 & 2.15139 & 7.57971 & 2.29058\\ 0 & 0 & 0 & 2.29058 & 1.52605\end{bmatrix}$$

可以看到，2-（和−2-）对角元出现了非零元素。参考特殊矩阵的 QR 分解，接下来，$\vec{v}_2^{(1)}$应该由$\vec{a}_{2:3,1}^{(1)}$而非$\vec{a}_{2:3,2}^{(1)}$生成以消除多余的非零对角元。此时，

$$\vec{v}_2^{(1)} = [0, -0.716988, -0.697085, 0, 0]^T$$

反射变换之后，

$$H_2^{(1)} H_1^{(1)} A_1 H_1^{(1)} H_2^{(1)} = \begin{bmatrix} 8.54228 & 2.33141 & 0 & 0 & 0 \\ 2.33141 & 7.41776 & 3.12502 & -2.15054 & 0 \\ 0 & 3.12502 & 0.669045 & 0.0605497 & 0 \\ 0 & -2.15054 & 0.0605497 & 7.57971 & 2.29058 \\ 0 & 0 & 0 & 2.29058 & 1.52605 \end{bmatrix}$$

以此类推，$\vec{v}_3^{(1)}$、$\vec{v}_4^{(1)}$均类似$\vec{v}_2^{(1)}$，最后我们就得到了A_2：

$$H_4^{(1)} \cdots H_1^{(1)} A_1 H_1^{(1)} \cdots H_4^{(1)} = \begin{bmatrix} 8.54228 & 2.33141 & 0 & 0 & 0 \\ 2.33141 & 7.41776 & -3.79349 & 0 & 0 \\ 0 & -3.79349 & 2.83344 & -3.45871 & 0 \\ 0 & 0 & -3.45871 & 6.18033 & -0.0016244 \\ 0 & 0 & 0 & -0.0016244 & 0.761041 \end{bmatrix}$$

可以看出，隐式位移避免了加减可能过大的s_k但仍旧具有和显式位移相同的收敛能力。除此之外，为了避免显式存储整个矩阵我们还需要知道如何简单地计算$H_{j-1}^{(k)} \cdots H_1^{(k)} A_k H_1^{(k)} \cdots H_{j-1}^{(k)}$在$H_j^{(k)}$下的变换。

此时$\vec{v}_j^{(k)} = \left[0, \ldots, 0, \beta_{j-1} \pm \sqrt{\beta_{j-1}^2 + c^2}, c, 0, \ldots, 0\right]^T$，而

$$H_j^{(k)} = I - \frac{1}{\gamma} \vec{v}_j^{(k)} \vec{v}_j^{(k)T} = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_1 & h_3 & 0 \\ 0 & h_3 & h_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I \end{bmatrix}, h_1 = -h_2 = c^2/\gamma - 1$$

其中$\gamma = \beta_{j-1}^2 + c^2 \pm \beta_{j-1}\sqrt{\beta_{j-1}^2 + c^2}$, $h_3 = -c\left(\beta_{j-1} \pm \sqrt{\beta_{j-1}^2 + c^2}\right)/\gamma$, 之前的变换结果$H_{j-1}^{(k)} \cdots H_1^{(k)} A_k H_1^{(k)} \cdots H_{j-1}^{(k)}$具有如下形式

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & & & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & & & & & & \\ & \ddots & \alpha_{j-2} & \beta_{j-2} & & & & & \\ & & \beta_{j-2} & \alpha_{j-1} & \beta_{j-1} & c & & & \\ & & & \beta_{j-1} & \alpha_j & \beta_j & & & \\ & & & c & \beta_j & \alpha_{j+1} & \ddots & & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

因此

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \beta_{j-1} & \alpha_j & \beta_j & c \\ 0 & \beta_j & \alpha_{j+1} & \beta_{j+1} \end{bmatrix} &\leftarrow \begin{bmatrix} h_1 & h_3 \\ h_3 & h_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{j-1} & \alpha_j & \beta_j & 0 \\ c & \beta_j & \alpha_{j+1} & \beta_{j+1} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \alpha_j & \beta_j \\ \beta_j & \alpha_{j+1} \end{bmatrix} &\leftarrow \begin{bmatrix} \alpha_j & \beta_j \\ \beta_j & \alpha_{j+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_1 & h_3 \\ h_3 & h_2 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{0.1}$$

这样一来，我们只需额外计算储存h_1、h_2、h_3和c即可完成整个过程。

此外，若我们需要特征向量，只需要计算$\prod_{k=1} H_1^{(k)} \cdots H_{n-1}^{(k)}$（右方向连乘）即可。最终，我们得到了利用隐式位移的 QR 变换的实对称三对角矩阵的特征分解：

输入：实对称三对角矩阵$\{\alpha_i\},\{\beta_i\}$；特征向量需要左乘的矩阵U
输出：该矩阵的特征值存储于$\{\alpha_i\}$；该矩阵的特征向量左乘U存储于U

寻找比对角元小机器精度的β_i以分割矩阵

隐式位移 QR：更新三对角阵A和特征向量U，位移s为右下角矩阵特征值中更靠近α_k的那一个

For $k = n, \dots, 2$ Do
    For $i = k-1, \dots, 1$ Do
        If $|\beta_i| < \varepsilon(|\alpha_i| + |\alpha_{i+1}|)$ Then Break i
    End For
    If $i = k-1$ Then Skip k /*特征值收敛*/
    $s \leftarrow \underset{\lambda}{\operatorname{argmin}}|\lambda - \alpha_k|, \lambda = \frac{1}{2}\left(\alpha_{k-1} + \alpha_k \pm \sqrt{(\alpha_{k-1} - \alpha_k)^2 + 4\beta_{k-1}^2}\right)$
    For $j = i, \dots, k$ Do
        If $j = i$ Then
            $\|\vec{y}\| \leftarrow \sqrt{(\alpha_i - s)^2 + \beta_i^2}$; $b \leftarrow \alpha_i - s$
            $c \leftarrow \beta_i$
        Else
            $\|\vec{y}\| \leftarrow \sqrt{c^2 + \beta_{j-1}^2}$; $b \leftarrow \beta_{j-1}$
        End If
        $\gamma \leftarrow \|\vec{y}\|^2 + |b|\|\vec{y}\|$
        $h_1 \leftarrow c^2/\gamma - 1$
        $h_2 \leftarrow 1 - c^2/\gamma$
        $h_3 \leftarrow -c(b + \operatorname{sign} b\,\|\vec{y}\|)/\gamma$
        利用公式(0.1)更新三对角阵元素和c
        $U_{:,j:j+1} \leftarrow U_{:,j:j+1}\begin{bmatrix} h_1 & h_3 \\ h_3 & h_2 \end{bmatrix}$
    End For
    Restart k /*未收敛，重新开始第二层循环不改变k*/
End For

算法 2 隐式位移 QR 变换的实对称三对角矩阵特征分解

若不计算特征向量，该算法的时间复杂度在平均情况下是$O(n^2)$：对每一个特征值都需要$O(n)$步反射变换才能收敛，实际大约为$2n$步，即 2 次 QR 变换。若需要计算特征向量，平均时间复杂度就是$O(n^3)$。

第4节 舒尔分解

§1 定义

舒尔分解指的是若矩阵$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，那么必定存在酉矩阵$U \in \mathbb{C}^{n\times n}$使得

$$U^* AU = T$$

其中$T \in \mathbb{C}^{n\times n}$为一上三角矩阵。根据上三角矩阵的行列式性质我们知道，T的对角元就是A的特征值。我们称这种舒尔分解为复舒尔分解。

将等式$AU = UT$一列一列来看，第k列就是：

$$A\vec{u}_k = \lambda_k \vec{u}_k + \sum_{i=1}^{k-1} t_{i,k}\vec{u}_i \quad (\lambda_k := t_{k,k})$$

也就是说，

$$A\vec{u}_k \in \operatorname{span}\{\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_k\}$$

所以任意前k个舒尔向量$\{\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_k\}$组成了一个$A$的不变子空间。最特殊的就是$\{\vec{u}_1\}$——它其实就是第一个$t_{1,1}$对应的特征向量。

对应地，实矩阵$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$也存在酉矩阵$U \in \mathbb{R}^{n\times n}$使得

$$U^TAU = \begin{bmatrix} T_{1,1} & T_{1,2} & \cdots & T_{1,t} \\ & T_{2,2} & \cdots & T_{2,t} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & T_{t,t} \end{bmatrix}$$

其中每一个$T_{i,i}$要不然是一个实数，表示A具有该特征值；要不然是一个2×2实矩阵$\begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \alpha \end{bmatrix}$（$\beta\gamma < 0$），代表$A$具有互为共轭的一对特征值$\alpha + \mathrm{i}\sqrt{-\beta\gamma}$、$\alpha - \mathrm{i}\sqrt{-\beta\gamma}$。我们称这种舒尔分解为实舒尔分解。

例如，矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 3.74809 & 3.88764 & 2.10135 & 1.75194 & 0.268092 & 1.37127 \\ 2.4017 & 1.72176 & 0.89634 & 0.585313 & 3.80375 & 3.48008 \\ 1.87596 & 1.30346 & 2.28016 & 3.55031 & 0.234249 & 1.23674 \\ 4.60383 & 3.65656 & 1.50011 & 4.04174 & 1.36608 & 3.30755 \\ 0.57907 & 4.66138 & 1.94013 & 2.84008 & 2.07986 & 4.88629 \\ 1.22869 & 1.64877 & 3.81297 & 4.6123 & 3.28562 & 3.07936 \end{bmatrix}$$

的实舒尔分解的T矩阵是

$$T = \begin{bmatrix} 15.109 & 2.26233 & -0.591732 & -1.39415 & -0.0581278 & -1.59071 \\ 0 & -2.93657 & -1.12939 & 0.929401 & 0.140671 & 0.526973 \\ 0 & 0 & 2.22716 & 3.37144 & 1.39725 & 0.0647171 \\ 0 & 0 & -0.812306 & 2.22716 & -2.56696 & 2.23815 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.898346 & -0.971017 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1.22254 \end{bmatrix}$$

其复舒尔分解的T矩阵是

$$T' = \begin{bmatrix} 15.109 & 0.275098 & 0.734986 & 1.24614 & 0.0519061 & 1.42045 \\ 0 & -2.93657 & -0.687932 & 0.374949 & 0.047575 & 0.178222 \\ 0 & 0 & 2.22716 & 2.3174 & 1.30758 & 0.0102787 \\ 0 & 0 & 0 & 2.22716 & -2.32477 & 1.76264 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.898346 & -0.971017 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1.22254 \end{bmatrix}$$
$$+ \begin{bmatrix} 0 & 2.24555 & 0.345444 & 0.285301 & -0.0261648 & -0.716017 \\ 0 & 0 & -0.849901 & 0.896181 & 0.132382 & 0.49592 \\ 0 & 0 & 1.65488 & 1.08572 & 1.06903 & -0.987859 \\ 0 & 0 & 0 & -1.65488 & 0.533285 & -0.964689 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\mathrm{i}$$

§2 海森伯格矩阵的舒尔分解

由于 QR 或下文将要介绍的阿诺尔迪迭代等方法可以将一个一般方阵正交变换为一个海森伯格矩阵，我们可以不失一般性地设$A \in \mathbb{F}^{n\times n}$是一个海森伯格矩阵，只需要实现它的舒尔分解即可。

同上一节的思路一样，对原始矩阵A不断应用 QR 变换，最后的结果矩阵A_s基本就是舒尔分解的结果：若$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，则$A_s$为一上三角矩阵，其对角元为$A$的特征值；若$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，则$A_s$为一分块上三角矩阵，每一个对角元矩阵$T_{i,i}$要不然是一个实数，表示$A$具有该特征值，要不然是一个$2\times 2$实矩阵（其两个对角元不

一定一样），其共轭特征值对均为A的特征值。该定理的证明同样可见数值分析教材，这里不再赘述。同样地，我们也有定理：若A非奇异且$B=Q^TAQ$，其中Q为正交矩阵而B为海森伯格矩阵，则Q的第一列完全确定了Q和B。这为我们使用隐式位移 QR 以加速收敛提供了条件。

另外，对于实数矩阵，由于位移有可能为复数，而这会引入我们不希望使用的复数运算（运算量增加多倍），故我们使用一种称作两步 QR 算法的方法，一次性计算

$$A_{k+2}=Q_{k+1}Q_kA_kQ_k^TQ_{k+1}^T$$

其中两次的位移分别取为s和$\bar{s}$,由于实矩阵的复数特征值永远以共轭复数对的形式出现，这避免了使用复数运算。此时，

$$\begin{aligned}A_k-sI&=Q_k^TR_k\\A_{k+1}&=Q_kA_kQ_k^T\\A_{k+1}-\bar{s}I&=Q_{k+1}^TR_{k+1}\end{aligned}$$

因此

$$Q_kA_kQ_k^T-\bar{s}I=Q_{k+1}^TR_{k+1}\Leftrightarrow A_k-\bar{s}I=Q_k^TQ_{k+1}^TR_{k+1}Q_k$$

若我们定义

$$M=(A_k-sI)(A_k-\bar{s}I)$$

则

$$R=QM$$

其中$R=R_{k+1}R_k$而$Q=Q_{k+1}Q_k$。因此$A_{k+2}=Q_{k+1}Q_kA_kQ_k^TQ_{k+1}^T$变为

$$A_{k+2}=QA_kQ^T$$

这样，我们就只需要确定M的 QR 分解的Q矩阵的第一列，之后逐步将矩阵恢复为海森伯格矩阵即可。

注意到

$$M=(A_k-sI)(A_k-\bar{s}I)=A_k^2-(s+\bar{s})A_k+s\bar{s}I$$

只有A_k^2贡献了M的下 2-对角线元素。经过计算，可以发现其第一列非零部分为

$$\vec{m}_{1:3,1}=\begin{bmatrix}s\bar{s}-(s+\bar{s})a_{1,1}+a_{1,1}^2+a_{1,2}a_{2,1}\\a_{2,1}\left(a_{1,1}+a_{2,2}-(s+\bar{s})\right)\\a_{2,1}a_{3,2}\end{bmatrix}$$

故Q第一列的反射向量$\vec{v}_1^{(k)}=[m_{1,1}\pm\|\vec{m}_{1:3,1}\|,m_{2,1},m_{3,1},0,\dots,0]^T$（未单位化）。

例如，希望对矩阵

$$A=\begin{bmatrix}-0.260662&-0.204006&0.13533&-0.408664&0.179327&-0.543618\\0.60462&-0.46534&-0.996806&-0.352452&0.372393&0.698925\\0&0.806209&0.186408&0.234502&-0.613998&-0.23159\\0&0&-0.0570047&-0.190926&-0.196383&-0.0797846\\0&0&0&0.321647&-0.916313&0.972468\\0&0&0&0&-0.399808&-0.956982\end{bmatrix}$$

做舒尔分解。第一步，同样地，我们将位移取为A_k的右下角2×2矩阵的特征值，即

$$s+\bar{s}=a_{n,n}+a_{n-1,n-1},\qquad s\bar{s}=a_{n,n}a_{n-1,n-1}-a_{n-1,n}a_{n,n-1}$$

此处$s,\bar{s}=-0.9366479\pm0.623207\mathrm{i}$。将上式代入可得$\vec{v}_1^{(k)}$的未单位化形式为

$$\begin{bmatrix}[(a_{n,n}-a_{1,1})(a_{n-1,n-1}-a_{1,1})-a_{n-1,n}a_{n,n-1}]/a_{2,1}+a_{1,2}\\a_{1,1}+a_{2,2}-(a_{n-1,n-1}+a_{n,n})\\a_{3,2}\end{bmatrix}$$

此处$\vec{v}_1^{(1)} = [0.907842, 0.343078, 0.241083, 0, 0, 0]^T$；对应的变换结果为（$A_1 = A$）

$$
\begin{aligned}
&H_1^{(1)} A_1 H_1^{(1)} \\
=&\begin{bmatrix}
-0.106187 & 0.107572 & 0.478533 & 0.38186 & -0.0794742 & 0.0184555 \\
0.204562 & -0.520838 & -0.988849 & -0.0537095 & 0.274591 & 0.911336 \\
-0.674894 & 0.618402 & 0.0874315 & 0.44443 & -0.682724 & -0.0823285 \\
0.0249527 & 0.00942974 & -0.0503784 & -0.190926 & -0.196383 & -0.0797846 \\
0 & 0 & 0 & 0.321647 & -0.916313 & 0.972468 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -0.399808 & -0.956982
\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

接下来，同上，本次 QR 变换中$\vec{v}_{j\geq 2}^{(1)}$等均要由$\vec{a}_{j:,j-1}$生成，也即

$$\vec{v}_2^{(1)} = [0, 0.803084, -0.595459, 0.0220157, 0, 0]^T$$

变换结果为

$$
\begin{aligned}
&H_2^{(1)} H_1^{(1)} A_1 H_1^{(1)} H_2^{(1)} \\
=&\begin{bmatrix}
-0.106187 & 0.412985 & 0.252079 & 0.390232 & -0.0794742 & 0.0184555 \\
-0.705656 & 0.124894 & 0.829691 & 0.430457 & -0.725618 & -0.340104 \\
0 & -0.791843 & -0.570308 & 0.0599027 & 0.0588961 & 0.84557 \\
0 & -0.0190053 & 0.033684 & -0.178918 & -0.223802 & -0.114091 \\
0 & -0.0113738 & 0.00843324 & 0.321335 & -0.916313 & 0.972468 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -0.399808 & -0.956982
\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

以此类推，最后

$$
\begin{aligned}
&H_5^{(1)} \cdots H_1^{(1)} A_1 H_1^{(1)} \cdots H_5^{(1)} \\
=&\begin{bmatrix}
-0.106187 & 0.412985 & -0.260202 & -0.341625 & 0.127396 & 0.147782 \\
-0.705656 & 0.124894 & -0.829276 & -0.241575 & 0.867168 & 0.133552 \\
0 & 0.792153 & -0.56691 & -0.0345199 & 0.445899 & -0.735743 \\
0 & 0 & 0.0417044 & -0.227389 & -0.205796 & -0.380883 \\
0 & 0 & 0 & -0.012747 & -0.674361 & -0.81885 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0.589433 & -1.15386
\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

也即A_2。

再如此进行 3 次 QR 变换，我们有

$$
A_5 = \begin{bmatrix}
-0.252699 & 0.425771 & 0.00357906 & -0.26819 & -0.511788 & -0.527744 \\
-0.925479 & -0.407302 & -0.872757 & 0.289819 & -0.741294 & 0.495542 \\
0 & 0.594922 & 0.154857 & 0.0279357 & 0.307838 & -0.403065 \\
0 & 0 & 0.0166419 & -0.264934 & 0.137308 & 0.321643 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -0.884088 & 0.440563 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -0.970652 & -0.949648
\end{bmatrix}
$$

可以看出右下角的特征对已经收敛，但是并未化为标准的舒尔形式分块对角矩阵。

收敛后，不再考虑这一部分，再进行 4 次 QR 变换，可以发现又有两个实数特征值一齐收敛了，此时

$$
A_9 = \begin{bmatrix}
-0.0284479 & 1.29193 & -0.0800464 & -0.286915 & -0.976772 & 0.0595435 \\
-0.679537 & -0.416318 & -0.311482 & -0.0007766 & 0.170012 & 0.583059 \\
0 & 0 & -0.0462353 & -0.252171 & 0.155548 & 0.508649 \\
0 & 0 & 0 & -0.279077 & 0.155469 & -0.285434 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -0.916868 & 0.440845 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -0.971273 & -0.916868
\end{bmatrix}
$$

对于最后左上角的2×2矩阵，经过计算发现其特征值为复数，因此计算结束。

在计算过程中，我们注意到任意反射变换矩阵均形如

$$
H_j^{(k)} = \begin{bmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & H & 0 \\ 0 & 0 & I \end{bmatrix}, H = \begin{bmatrix} h_1 & h_4 & h_5 \\ h_4 & h_2 & h_6 \\ h_5 & h_6 & h_3 \end{bmatrix}
$$

计算反射变换矩阵与原矩阵的乘积同样很简便：只需要对行和列分别作用H即可。

当然，这样收敛到的2×2对角元可能不是标准的舒尔形式，但是将其变换

为舒尔形式并不困难：设$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$，目标是用豪斯霍尔德正交变换将其变为$\begin{bmatrix} (a+d)/2 & e \\ f & (a+d)/2 \end{bmatrix}$，其中$e$、$f$异号；若$\vec{v} = \left[p, \sqrt{1-p^2}\right]^T$，可解得

$$2p^2-1, -2p\sqrt{1-p^2} = \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{1 \pm \frac{|b+c|}{\sqrt{(b+c)^2+(a-d)^2}}} \tag{0.2}$$

也就得到了$H = I - 2\vec{v}\vec{v}^T = \begin{bmatrix} 1-2p^2 & -2p\sqrt{1-p^2} \\ -2p\sqrt{1-p^2} & 2p^2-1 \end{bmatrix}$；当$a > d$时，上式中正号在前，否则负号在前（显然，当$a = d$时不需要进行任何操作）。

另外，也有可能上式中的A的特征值为两个实数，也即当$(a-d)^2 + 4bc \geq 0$时，此时，

$$2p^2-1, -2p\sqrt{1-p^2} = \sqrt{\frac{2\alpha(b+c) + (a-d)\left[a-d \pm \sqrt{4bc+(a-d)^2}\right]}{2[(b+c)^2+(a-d)^2]}} \tag{0.3}$$

其中α对于第一个是b、第二个是c，式中正号在前。

最终，我们得到了利用隐式位移的 QR 变换的海森伯格矩阵的舒尔分解：

输入：实海森伯格矩阵$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$；舒尔向量需要左乘的矩阵$U$
输出：该矩阵的特征值$\{\lambda_i\}$；舒尔形式存储于A；舒尔向量存储于U
For $k = n, \ldots, 2$ **Do**

寻找比对角元小机器精度的下对角元以分割矩阵

  For $i = k, \ldots, 2$ **Do**
    If $|a_{i,i-1}| < \varepsilon(|a_{i,i}| + |a_{i-1,i-1}|)$ **Then Break** i
  End For
  If $i = k$ **Then** $\lambda_k = a_{i,i}$; **Skip** k /*实特征值收敛*/
  If $i = k-1$ **Then** /*特征值对收敛*/
    $H \leftarrow A_{i:k,i:k}$根据公式(0.2)和(0.3)得到的对称正交变换矩阵
    $A_{i:k,:} \leftarrow HA_{i:k,:}$; $A_{:,i:k} \leftarrow A_{:,i:k}H$; $U_{:,i:k} \leftarrow U_{:,i:k}H$
    If $|a_{i,k}a_{k,i}| < \varepsilon a_{i,i}^2$ **Then** $a_{i,k} \leftarrow a_{k,i} \leftarrow 0$
    $\lambda_i, \lambda_k = \alpha \pm \mathrm{i}\sqrt{-a_{i,k}a_{k,i}}$
    Skip $k, k+1$
  End If

隐式位移 QR：更新海森伯格矩阵A和舒尔向量U，位移为右下角矩阵特征值

  For $j = i, \ldots, k-1$ **Do**
    If $j = i$ **Then**
      $\vec{v} \leftarrow \begin{bmatrix} [(a_{k,k}-a_{i,i})(a_{k-1,k-1}-a_{i,i}) - a_{k-1,k}a_{k,k-1}]/a_{i+1,i} + a_{i,i+1} \\ a_{i,i} + a_{i+1,i+1} - (a_{k-1,k-1}+a_{k,k}) \\ a_{i+2,i+1} \end{bmatrix}$
    Else
      $\vec{v} \leftarrow \vec{a}_{j:j+2,j-1}$
    End If
    $v_1 \leftarrow v_1 + \mathrm{sign}(v_1)\|\vec{v}\|$; $H \leftarrow I - 2\vec{v}\vec{v}^T/\|\vec{v}\|^2$
    $A_{j:j+2,:} \leftarrow HA_{j:j+2,:}$; $A_{:,j:j+2} \leftarrow A_{:,j:j+2}H$
    $U_{:,j:j+2} \leftarrow U_{:,j:j+2}H$
    End For

```
        If $j \neq i$ Then $\vec{a}_{j+1:,j-1} \leftarrow \vec{0}$   /*恢复A的零元素避免累积误差*/
    End For
    Restart $k$                  /*未收敛，重新开始第二层循环不改变k*/
End For
```

算法 3 隐式位移 QR 变换的海森伯格矩阵的特征分解

无论是否计算特征向量，该算法时间复杂度在平均情况下均为$O(n^3)$：对每一个特征值都需要$O(n^2)$步才能收敛，一般约为$2n^2$步，即 2 次 QR 变换。

§3 舒尔分解的重排

目前最简单且广泛使用的舒尔分解重排方法源自 (Bait & Demmel, 1993)，原始算法仅用来交换两个相邻的1×1或2×2舒尔对角块，但是利用这种方法，我们可以使用冒泡排序重排整个舒尔分解。

设要交换的相邻舒尔对角块的特征值不同（相同则不可能需要交换），形如

$$A=\begin{bmatrix}A_{1,1} & A_{1,2}\\ 0 & A_{2,2}\end{bmatrix}$$

其中$A_{1,1}\in\mathbb{R}^{p\times p}$而$A_{2,2}\in\mathbb{R}^{q\times q}$，$p,q\in\{1,2\}$。$A$可以分块对角化：

$$\begin{bmatrix}A_{1,1} & A_{1,2}\\ 0 & A_{2,2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}I_p & -X\\ 0 & I_q\end{bmatrix}\begin{bmatrix}A_{1,1} & 0\\ 0 & A_{2,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}I_p & X\\ 0 & I_q\end{bmatrix}$$

其中$X\in\mathbb{R}^{p\times q}$是方程

$$A_{1,1}X-XA_{2,2}=A_{1,2}$$

的解。此方程可重写为线性方程组：

$$\begin{bmatrix}\alpha_1 & \beta_1\\ \gamma_1 & \delta_1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_{1,1} & x_{1,2}\\ x_{2,1} & x_{2,2}\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}x_{1,1} & x_{1,2}\\ x_{2,1} & x_{2,2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_2 & \beta_2\\ \gamma_2 & \delta_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}t_1 & t_2\\ t_3 & t_4\end{bmatrix}$$

$$\Leftrightarrow\begin{bmatrix}\alpha_1-\alpha_2 & -\gamma_2 & \beta_1 & 0\\ -\beta_2 & \alpha_1-\delta_2 & 0 & \beta_1\\ \gamma_1 & 0 & \delta_1-\alpha_2 & -\gamma_2\\ 0 & \gamma_1 & -\beta_2 & \delta_1-\delta_2\end{bmatrix}\vec{x}=\begin{bmatrix}t_1\\ t_2\\ t_3\\ t_4\end{bmatrix}\tag{0.4}$$

其中$\vec{x}=[x_{1,1},x_{1,2},x_{2,1},x_{2,2}]^T$。对于其他三种情况，方程组会更加简单：

$$\begin{bmatrix}\alpha_1-\alpha_2 & -\gamma_2\\ -\beta_2 & \alpha_1-\delta_2\end{bmatrix}\vec{x}=\begin{bmatrix}t_3\\ t_4\end{bmatrix}\tag{0.5}$$

$$\begin{bmatrix}\alpha_1-\alpha_2 & \beta_1\\ \gamma_1 & \delta_1-\alpha_2\end{bmatrix}\vec{x}=\begin{bmatrix}t_1\\ t_3\end{bmatrix}\tag{0.6}$$

$$(\alpha_1-\alpha_2)x=t_3\tag{0.7}$$

之后将X做 QR 分解

$$Q^T\begin{bmatrix}-X\\ I_q\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}R\\ 0\end{bmatrix}$$

此时

$$Q^T\begin{bmatrix}-X & I_p\\ I_q & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}R & Q_{1,1}^T\\ 0 & Q_{1,2}^T\end{bmatrix}$$

故

$$Q^TAQ=\begin{bmatrix}RA_{2,2}R^{-1} & A'_{1,2}\\ 0 & Q_{1,2}^TA_{1,1}Q_{1,2}^{-T}\end{bmatrix}$$

具有和A同样的分块上三角形式，且$RA_{2,2}R^{-1}\sim A_{1,1}$、$Q_{1,2}^TA_{1,1}Q_{1,2}^{-T}\sim A_{2,2}$，符合交换的要求。但是，注意到$RA_{2,2}R^{-1}$和$Q_{1,2}^TA_{1,1}Q_{1,2}^{-T}$若是$2\times 2$矩阵，则不一定满足标准舒尔形式的要求，仍旧需要变换回去，这个我就不再赘述。最终，只需要对A_s做正交变换、舒尔向量右乘以Q'即可：

$$A_s\leftarrow\begin{bmatrix}I_1&0&0\\0&Q'^*&0\\0&0&I_2\end{bmatrix}A_s\begin{bmatrix}I_1&0&0\\0&Q'&0\\0&0&I_2\end{bmatrix},\qquad U\leftarrow U\begin{bmatrix}I_1&0&0\\0&Q'&0\\0&0&I_2\end{bmatrix}$$

上例的舒尔分解结果为

$$T=\begin{bmatrix}-0.222383&1.34818&-0.00988929&0.275342&-0.715743&0.685518\\-0.623287&-0.222383&0.321451&0.0806696&0.37062&0.454874\\0&0&-0.0462354&-0.252171&-0.489121&-0.208997\\0&0&0&-0.279077&0.117979&0.30286\\0&0&0&0&-0.916868&0.438544\\0&0&0&0&-0.972671&-0.916868\end{bmatrix}$$

若我们希望按照特征值模长排序，最大的在左上角，则需要把右下角对角块移动到左上角，并将特征值-0.222383和-0.0462354移动到右下角。

首先，令

$$A=\begin{bmatrix}\begin{bmatrix}-0.279077\end{bmatrix}&\begin{bmatrix}0.117979&0.30286\end{bmatrix}\\0&\begin{bmatrix}-0.916868&0.438544\\-0.972671&-0.916868\end{bmatrix}\end{bmatrix}$$

方程$A_{1,1}X-XA_{2,2}=A_{1,2}$即

$$\begin{bmatrix}\alpha_1-\alpha_2&-\gamma_2\\-\beta_2&\alpha_1-\alpha_2\end{bmatrix}\vec{x}=\begin{bmatrix}t_3\\t_4\end{bmatrix}$$

代入可得$\begin{bmatrix}0.637791&0.972671\\-0.438544&0.637791\end{bmatrix}\vec{x}=\begin{bmatrix}0.117979\\0.30286\end{bmatrix}$，解得$X=[-0.263204,0.293879]$。然后，完整 QR 分解得到$Q$矩阵

$$Q=\begin{bmatrix}-0.254535&0.26437&0.930226\\-0.967064&-0.0695831&-0.244839\\0&-0.961908&0.273374\end{bmatrix}$$

以及

$$Q^TAQ=\begin{bmatrix}-0.846506&0.441268&-0.280672\\-0.977885&-0.98723&-0.0663183\\0&0&-0.279077\end{bmatrix}$$

我们就成功地交换了右下角的两个块。之后以此类推，不难完成整个操作。当全部交换完成后，再统一做正交变换变为规范舒尔形式即可。

因为$\sup(p+q)=4$为一常数，故该过程的时间复杂度为$O(n)$，最多约为$4n$次浮点运算每列。我们又知道冒泡排序的时间复杂度为$O(n^2)$，故整个排序过程的复杂度为$O(n^3)$。最后，我们就得到了整个舒尔分解重排的算法：

输入：舒尔形式A；舒尔向量U；特征值$\{\lambda_i\}$；排序依据$\{key_i\}$
输出：根据$\{key_i\}$排序后的特征值$\{\lambda_i\}$、舒尔形式A和舒尔向量U
　For $k=2,\dots,n$ **Do**
　　For $i=n,\dots,k$ **Do**
　　　　$q\leftarrow\left|\operatorname{sign}a_{i,i-1}\right|+1$
　　　　$p\leftarrow\left|\operatorname{sign}a_{i-q,i+q-1}\right|+1$
　　　　If $key_i\geq key_{i-q}$ **Then Skip** i **To** $i-q$

交换$\{key_i, key_{i+q-1}\}$和$\{key_{i-1}, key_{i-p}\}$
交换$\{\lambda_i, \lambda_{i+q-1}\}$和$\{\lambda_{i-1}, \lambda_{i-p}\}$

交换i、$i-1$对应块

$\begin{bmatrix} T_{1,1} & T_{1,2} \\ 0 & T_{2,2} \end{bmatrix} \leftarrow A_{i-p:i+q-1,i-p:i+q-1}$

$X \leftarrow$ 依据前文公式(0.4)~(0.7)求解$T_{1,1}X - XT_{2,2} = T_{1,2}$

$Q \xleftarrow{\text{完整 QR 分解}} \begin{bmatrix} -X \\ I_q \end{bmatrix}$

$A_{i-p:i+q-1,:} \leftarrow Q^T A_{i-p:i+q-1,:}$

$A_{:,i-p:i+q-1} \leftarrow A_{:,i-p:i+q-1} Q$

$U_{:,i-p:i+q-1} \leftarrow U_{:,i-p:i+q-1} Q$

Skip i To $i-p$

End For

If $|a_{k,k-1}| < \varepsilon(|a_{k-1,k-1}| + |a_{k,k}|)$ Then

将冒泡排序刚确定次序的元素变换到规范舒尔形式

使用算法 3 的方法化$A_{k-1:k,k-1:k}$为规范舒尔形式

Skip k To $k+1$

End If

End For

算法 4 舒尔分解的重排

第5节 海森伯格矩阵的特征分解

在上一节中，我们得到了海森伯格矩阵的舒尔分解，在分解过程中我们就已经得到了矩阵A的特征值以及对应的舒尔形式T和舒尔向量U。最简单的计算特征向量的方法就是解一系列上三角矩阵的线性方程组，即

$$(T - \lambda_i I)\vec{u} = \vec{0}$$

利用回代算法，单次计算时间复杂度为$\Theta(n^2)$，共需要$\Theta(n^3)$次浮点计算就能得到所有特征向量。然而，该方法有一定的局限性：①若λ_i为复数，则会引入不希望出现的复数运算；②若λ_i为多重特征值，则简单回代算法无法求出λ_i对应的特征空间的基。为了解决这些问题，我们需要做一些改动。

先回忆计算矩阵的零空间基的方法。对于方阵$A \in \mathbb{F}^{n\times n}$，经过行约化它变为

$$\ker A = \ker T \equiv \ker \begin{bmatrix} d_1 & t_{1,2} & \cdots & t_{1,n} \\ 0 & d_2 & \cdots & t_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_n \end{bmatrix}$$

其中$d_i = 0$或1，$d_i = 0$的行全为0，其零空间是齐次线性方程组$T\vec{x} = \vec{0}$的解空间。设$\mathcal{P} = \{i | d_i = 0\}$，则$x_{i\in\mathcal{P}}$为自由变量，取$\vec{z} := \{x_{i\in\mathcal{P}}\} = \vec{e}_1, \dots, \vec{e}_{n-r(A)}$，只需解$n - r(A)$个行最简线性方程组（也即同样多次回代算法）即可得到所需的零空间的基。

例如舒尔形式

$$A = \begin{bmatrix} 0.815373 & 1.42317 & -0.253261 & 0.0073923 & 0.599984 & -0.829227 \\ -0.373364 & 0.815373 & -0.153782 & 0.263274 & -0.144811 & 0.0478312 \\ 0 & 0 & -0.88416 & 1.18541 & -0.0390394 & 0.717003 \\ 0 & 0 & -1.57779 & -0.88416 & -0.919224 & 0.668787 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.806528 & -0.0750158 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.806528 \end{bmatrix}$$

可以看出它的特征值-0.806528是二重的。对$A+0.806528I$正向行约化有

$$A+0.806528I \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0.877469 & -0.156151 & 0.0045578 & 0.369926 & -0.511268 \\ 0 & 1 & -0.108788 & 0.135918 & -0.00343388 & -0.0733813 \\ 0 & 0 & 1 & -15.2696 & 0.502879 & -9.23596 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0.00520423 & 0.575246 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

可以看出其秩为$6-1=5$，因此线性方程组$(A+0.806528I)\vec{x}=\vec{0}$刚好有一个解，将自由变量$x_5$设为 1，有

$$\vec{x}=[-0.408881,-0.0592108,-0.582346,-0.00520423,1,0]^T$$

不难验证

$$A\vec{x}=-0.806528\vec{x}$$

更进一步地，我们其实不必解这些方程组：因为$d_{i\in\mathcal{P}}$所在列的前$r(A)$行所组成的A的子矩阵（记为$\{\vec{b}_j\}$）与单位阵自然组成了A的零空间的一组基：

$$\ker A=\operatorname{span}\left\{\left[\vec{b}_j^T,-\vec{e}_j^T\right]\right\}$$

只需对其正交单位化即可得到所需特征向量。

对上例的矩阵来说，也即，只需要将$A+0.806528I$再反向行约化即可：

$$A+0.806528I \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0.408881 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0.0592108 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0.582346 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0.00520423 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

对照上例的解，不难发现，$\vec{x}$就是这个对角元为零的列与单位阵组合的结果，也即

$$\ker(A-\lambda I)=\operatorname{span}\left\{\left[\vec{b}_j^T,-\vec{e}_j^T\right]\right\}$$

现在，对于实特征值，只需要知道如何将舒尔形式化为行最简形式就可以解决问题②。我们知道，经过算法 3 和算法 4，具有相同特征值的舒尔形式A_s的对角元必然相邻，因此，正向行约化后，

$$A_s-\lambda_i I \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & t_{1,2} & \cdots & t_{1,p-1} & t_{1,p} & \cdots & t_{1,q} & \cdots \\ & 1 & \cdots & t_{2,p-1} & t_{2,p} & \cdots & t_{2,q} & \cdots \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & t_{p-1,p} & \cdots & t_{p-1,q} & \cdots \\ & & & & 0 & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & & \ddots & t_{q-1,q} & \cdots \\ & & & & & & 0 & \cdots \\ & & & & & & & \ddots \end{bmatrix} \tag{0.8}$$

不难发现，子矩阵

$$\begin{bmatrix} 0 & t_{p,p+1} & \cdots & t_{p,q} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & t_{q-1,q} \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

不受到前后的行最简形式的影响，因此，当且仅当该矩阵有l列全为 0 时，λ_i对应的特征空间的维数就是l；显然，$1\le l\le q-p+1$。因此，

$$[\vec{b}_1,\dots]=\begin{bmatrix}t_{1,p} & \cdots & t_{1,q}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ t_{p,p} & \cdots & t_{p,q}\end{bmatrix}$$

相比于A_s仅被之前的2×2对角块的行约化和对角元缩放到 1 影响。进一步地，逆向行约化后，不全为 0 的列l对应的$\vec{b}_l$会被最终约化为 0，剩余的列会依次向前约化。这里不再赘述。

至于问题①，我们则需要占用额外空间用以处理复数，这里也不再赘述，详见具体算法：

输入：舒尔形式$A\in\mathbb{R}^{n\times n}$；特征值$\{\lambda_i\}$；舒尔向量$U$
输出：A的右特征向量左乘以U（即原矩阵的右特征向量）存储于V
For $k=1,\dots,n$ **Do**
  $l\leftarrow\max\{l|\lambda_l=\lambda_k$ **or** $\lambda_l=\overline{\lambda_k}\}$
  $V_{:,k:l}\leftarrow A_{:,k:l}$
  $V_{k:n,k:l}\leftarrow 0$
  $\vec{\beta}\leftarrow-\operatorname{diag}_{-1}A_{0:k-1,0:k-1}/(\operatorname{diag}A_{0:k-2,0:k-2}-\lambda_k)$
  $\vec{\alpha}\leftarrow 1/(\operatorname{diag}A_{1:k-1,1:k-1}+\vec{\beta}\odot\operatorname{diag}_1A_{0:k-1,0:k-1}-\lambda_k)$
  $\vec{\beta}\leftarrow\vec{\alpha}\odot\vec{\beta}$ /*按元素相乘*/

设超出下标范围的值均为零，如 $a_{i,0}=a_{0,i}=0$

  If $\operatorname{Im}\lambda_k=0$ **Then**
    $\mathcal{J}\leftarrow\{i|\vec{a}_{k:i-1,i}=\vec{0},k<i\le l\}\cup\{k\}$ /*找到全为 0 的列*/

实特征值

  Else
    $\mathcal{J}\leftarrow\{i|\vec{a}_{k:i-2,i}=\vec{0},k+1<i\le l,i-k\bmod 2\equiv 0\}\cup\{k\}$ /*找到全为 0 的列*/
    /*一般来讲，$V_{:,k:l}$会一直保持实数矩阵：$V_{:,i+1}$存储其实部，$V_{:,i}$存储其虚部，这要求下面几行特殊处理$V_{:,i+1}$*/

复特征对：此时$\vec{\alpha}$、$\vec{\beta}$、T均为复数

  End If
  $V_{1:k-1,\mathcal{J}}\leftarrow\operatorname{diag}\vec{\beta}\cdot V_{0:k-2,\mathcal{J}}+\operatorname{diag}\vec{\alpha}\cdot V_{1:k-1,\mathcal{J}}$ /*化为公式(0.6)*/

行约化

  For $j=k-2,\dots,1$ **Do**
    $V_{1:j,\mathcal{J}}\leftarrow V_{1:j,\mathcal{J}}-(\vec{\beta}_{1:j}\odot\vec{a}_{0:j-1,j+1}+\vec{\alpha}_{1:j}\odot\vec{a}_{1:j,j+1})\otimes\vec{v}_{k-1,\mathcal{J}}$
  End For /*化为行最简*/
  $V_{k:n,\mathcal{J}}\leftarrow-[\vec{e}_1,\dots,\vec{e}_{|\mathcal{J}|}]$
  $V_{:,\mathcal{J}}\leftarrow$ **Orthogonalize**$(V_{:,\mathcal{J}})$
  $V_{:,\bar{\mathcal{J}}}\leftarrow 0$ /*$\bar{\mathcal{J}}=\{i|i\notin\mathcal{J},k\le i\le l\}$*/
  $V_{:,\mathcal{J}}\leftarrow U\cdot V_{:,\mathcal{J}}$ /*左乘以舒尔向量得到结果*/
  Skip k **to** $l+1$
End For

得到特征向量

算法 5 利用行约化方法求解舒尔形式的特征向量

该算法中，$\vec{\beta}$代表的是正向行约化中消去 1-对角元需要的初等行变换矩阵$E_{i,i+1}(k)$的系数k；$\vec{\alpha}$代表的是正向行约化中之后将对角元变为 1 需要的初等行

变换矩阵$E_i(k)$的系数k。$\vec{\beta} \leftarrow \vec{\alpha} \odot \vec{\beta}$则是为了简化原本的

$$V_{1:k-1,\mathcal{J}} \leftarrow \operatorname{diag}\vec{\beta} \cdot \operatorname{diag}\vec{\alpha} \cdot V_{0:k-2,\mathcal{J}} + \operatorname{diag}\vec{\alpha} \cdot V_{1:k-1,\mathcal{J}}$$

而简化后的公式实际上也是通过向量按元素相乘实现的。

第6节 其他证明

§1 瑞利商

$$\rho(\vec{x}, A) := \frac{\vec{x}^* A \vec{x}}{\vec{x}^* \vec{x}}$$

称作矩阵$A \in \mathbb{F}^{m\times m}$对向量$\vec{x}$的**瑞利商**（Rayleigh quotient）。

由于$\rho(\alpha\vec{x}, A) = \rho(\vec{x}, A)$，可以只研究单位长度的$\vec{x}$。这样，瑞利商就变为

$$\rho(\vec{x}, A) = \vec{x}^* A \vec{x} \equiv \|\vec{x}\|_A$$

即在以A的列向量为基的线性空间中$\vec{x}$的模长。

对于厄米矩阵A来说，$\rho(\vec{x}, A)$的可能的最大最小值就是其特征值中最大和最小的两个。证明如下：设A的特征分解为$A = V\Lambda V^*$，我们有

$$\rho(\vec{x}, A) = \vec{x}^* A \vec{x} = \vec{x}^* V\Lambda V^* \vec{x} = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i |\vec{u}_i^* \vec{x}|^2$$

进行缩放，假设λ已经排好序，即$\lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_n$，有

$$\lambda_1 \sum_{i=1}^{m} |\vec{u}_i^* \vec{x}|^2 = \lambda_1 \le \sum_{i=1}^{m} \lambda_i |\vec{u}_i^* \vec{x}|^2 \le \lambda_m \sum_{i=1}^{m} |\vec{u}_i^* \vec{x}|^2 = \lambda_n$$

也即

$$\lambda_1 \le \rho(\vec{x}, A) \le \lambda_m, \qquad \rho(\vec{u}_i, A) = \lambda_i$$

所以，

$$\min_{\vec{x}} \rho(\vec{x}, A) = \lambda_1, \max_{\vec{x}} \rho(\vec{x}, A) = \lambda_m$$

证毕。■

下面我来证明一下正文中还要用到的单调性定理：若$A \in \mathbb{F}^{m\times m}$是一个厄米矩阵，$\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n$是一组单位正交基，令$Q := [\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_n]$，则$A' := Q^* A Q \in \mathbb{F}^{n\times n}$；此时，$A'$的特征值$\lambda'_1 \le \cdots \le \lambda'_n$满足

$$\lambda'_i \le \lambda_i, \qquad \forall 1 \le i \le n$$

证明：令$\vec{w}_1, \dots, \vec{w}_n \in \mathbb{F}^n$为$A'$的特征向量，即其特征分解为$A' = W\Lambda' W^*$，故$Q\vec{w}_1, \dots, Q\vec{w}_k$（$k$就是关心的特征向量的指标）就是天然单位正交的，这样一来，我们就可以用这组基构造一个单位向量$\vec{x}_0$：

$$\vec{x}_0 := \sum_{i=1}^{k} a_i Q\vec{w}_i = Q \sum_{i=1}^{k} a_i \vec{w}_i := Q\vec{a}$$

并保证它垂直于所有指标小于k的A的特征向量$\vec{u}_i$：

$$\langle \vec{x}_0, \vec{u}_i \rangle = 0, \qquad \forall 1 \le i \le k-1$$

又因为λ_k是第k小的特征值，根据之前的定理，λ_k就是前$k-1$个特征向量组成的空间之外的空间中最小的瑞利商，也即

$$\lambda_k = \min_{\vec{x}, \langle \vec{x}_0, \vec{u}_i \rangle = 0, \forall i < k} \rho(\vec{x}, A)$$

因此

$$\lambda_k \le \rho(\vec{x}_0, A) = \vec{x}_0^* A \vec{x}_0 = \vec{a}^*(Q^*AQ)\vec{a} = \vec{a}^* A' \vec{a} = \vec{a}^* W \Lambda' W^* \vec{a} = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i' |\vec{w}_i^* \vec{a}|^2$$
$$= \sum_{i=1}^{k} \lambda_i' |a_i|^2 \le \lambda_k'$$

证毕。■

§2 实对称矩阵的重数

设对称三对角矩阵

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

则$A-\lambda I$（λ为A的某一特征值）删去第一行最后一列就是

$$\begin{bmatrix} \beta_2 & \alpha_2-\lambda & \beta_3 & & \\ & \beta_3 & \alpha_3-\lambda & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{n-2} \\ & & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1}-\lambda \\ & & & & \beta_{n-1} \end{bmatrix}$$

它是一个上三角矩阵，且对角元全不为 0，所以它是满秩（$n-1$）的，所以$\operatorname{rank}(A-\lambda I) \ge n-1$；所以$\det(A-\lambda I)$中根 0 的重数最多为 1（因为矩阵的秩等于矩阵的特征多项式阶数减去 0 的重数），也即A的所有特征值重数均为 1。■

同理，对于带宽为$2\nu+1$的、非对角元全不为 0 的实对称矩阵$T \in \mathbb{R}^{n\times n}$，

$$T = \begin{bmatrix} \mathrm{A}_1 & \mathrm{B}_1^T & & & \\ \mathrm{B}_1 & \mathrm{A}_2 & \mathrm{B}_2^T & & \\ & \mathrm{B}_2 & \mathrm{A}_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \mathrm{B}_{j-1}^T \\ & & & \mathrm{B}_{j-1} & \mathrm{A}_j \end{bmatrix}$$

其中$j=n/\nu$，$\mathrm{A}^* = \mathrm{A}^T = \mathrm{A} \in \mathbb{R}^{\nu\times\nu}$，$\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{\nu\times\nu}$是一个上三角矩阵。我们只需将$\hat{T}-\lambda I$删去前$\nu$行最后$\nu$列就可以得到一个对角元全不为 0 的上三角矩阵

$$\begin{bmatrix} \mathrm{B}_2 & \mathrm{A}_2-\lambda I & \mathrm{B}_3^T & & \\ & \mathrm{B}_3 & \mathrm{A}_3-\lambda I & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \mathrm{B}_{j-2}^T \\ & & & \mathrm{B}_{j-2} & \mathrm{A}_{j-1}-\lambda I \\ & & & & \mathrm{B}_{j-1} \end{bmatrix}$$

也即$\operatorname{rank}\big(\hat{T}-\lambda I\big) \ge (j-1)\nu = n-\nu$，所以$T$的所有特征值重数最多为$\nu$。■