第三章 矩阵特征值与特征向量的计算

求解本征值方程 AX=aX。

矩阵的特征值和特征向量是线性代数以及矩阵论中非常重要的一个概念。除了在量子力学是最主要的问题外，在遥感领域也是经常用到，比如多光谱以及高光谱图像的主成分分析要求解波段间协方差矩阵或者相关系数矩阵的特征值和特征向量。

量子力学中遇到的矩阵都是对称矩阵（厄米矩阵），求解的方法一般分以下几步：

（1） 利用豪斯赫尔德变换约化为三对角阵

（2） 然后利用 QR 分解**或者 LU** 分解化为上三角和下三角矩阵（针对厄米对称矩阵），

（3） 然后求解本征值。

我们这里讲解“雅克比方法”求解矩阵本征值问题

例子 试用Jacobi 方法 计算矩阵的全部特征值和相应的特征向量. （误差为$\varepsilon=10^{-3}$）

$$A=\begin{bmatrix} 3.5 & -6 & 5 \\ -6 & 8.5 & \boxed{-9} \\ 5 & -9 & 8.5 \end{bmatrix}$$

第一步：选非对角线元素中的主元素

$$a_{23}=-9\,(p=2,q=3),\quad a_{22}=a_{33},\quad \tan 2\theta=\infty$$

$$\therefore \theta=\frac{\pi}{4}\operatorname{sgn}(a_{23})=-\frac{\pi}{4}$$

$$\cos\theta=\frac{1}{\sqrt{2}},\quad \sin\theta=-\frac{1}{\sqrt{2}}$$

数值分析与有限元编程

$$A_1 = Q_{23}^T A Q_{23}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3.5 & -6 & 5 \\ -6 & 8.5 & -9 \\ 5 & -9 & 8.5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 3.5 & \boxed{-7.7782} & -0.7071 \\ -7.7782 & 17.5 & 0 \\ -0.7071 & 0 & -0.5 \end{bmatrix}$$

第二步:在 A_1 中选非对角线元素中的主元素

$$a_{12}^{(1)} = -7.7782\ (p=1, q=2),\ \tan 2\theta = \frac{2a_{12}^{(1)}}{a_{11}^{(1)} - a_{22}^{(1)}} = \frac{1}{c}$$

$$c = \frac{3.5 - 17.5}{-2 \times 7.7782} = 0.89995 \approx 0.9,\quad t = \frac{1}{0.9 + \sqrt{0.9^2 + 1}} = 0.4454$$

$$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} = 0.9135,\quad \sin\theta = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}} = 0.4069$$

数值分析与有限元编程

$$A_2 = Q_{12}^T A_1 Q_{12}$$

$$= \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 3.5 & -7.7782 & -0.7071 \\ -7.7782 & 17.5 & 0 \\ -0.7071 & 0 & -0. \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0.0358 & 0 & \boxed{-0.6459} \\ 0 & 20.9653 & 0.2877 \\ -0.6459 & 0.2877 & -0.5 \end{bmatrix}$$

第三步：在 A_2 中选非对角线元素中的主元素

$$a_{13}^{(2)} = -0.6459 \ (p=1, q=3), \ \tan 2\theta = \frac{2a_{13}^{(2)}}{a_{11}^{(2)} - a_{33}^{(2)}} = \frac{1}{c}$$

$$c = \frac{0.0358 + 0.5}{-2 \times 0.6459} = -0.4148, \quad t = \frac{-1}{0.4148 + \sqrt{0.4148^2 + 1}} = -0.6678$$

$$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} = 0.8316, \quad \sin\theta = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}} = -0.5554$$

数值分析与有限元编程

$$A_3 = Q_{13}^T A_2 Q_{13}$$

$$= \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0.0358 & 0 & -0.6459 \\ 0 & 20.9653 & 0.2877 \\ -0.6459 & 0.2877 & -0.5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0.4672 & -0.1598 & 0 \\ -0.1598 & 20.9653 & \boxed{0.2392} \\ 0 & 0.2392 & -0.9312 \end{bmatrix}$$

第四步 :在 A_3 中选非对角线元素中的主元素

$$a_{23}^{(3)} = 0.2392\ (p=2, q=3),\ \tan 2\theta = \frac{2a_{23}^{(3)}}{a_{22}^{(3)} - a_{33}^{(3)}} = \frac{1}{c}$$

$$c = \frac{20.9653 + 0.9312}{2 \times 0.2392} = 45.7703,\ t = \frac{1}{45.7703 + \sqrt{45.7703^2 + 1}} = 0.0109$$

$$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} = 0.9999, \quad \sin\theta = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}} = 0.0107$$

数值分析与有限元编程

$$A_4 = Q_{23}^T A_3 Q_{23}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0.4672 & -0.1598 & 0 \\ -0.1598 & 20.9653 & 0.2392 \\ 0 & 0.2392 & -0.9312 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0.4672 & \boxed{-0.1598} & -0.0017 \\ -0.1598 & -0.9340 & 0 \\ -0.0017 & 0 & 20.9669 \end{bmatrix}$$

第五步：在 A_4 中选非对角线元素中的主元素

$$a_{12}^{(4)} = -0.1598\ (p=1, q=2),\ \tan 2\theta = \frac{2a_{12}^{(4)}}{a_{11}^{(4)} - a_{22}^{(4)}} = \frac{1}{c}$$

$$c = \frac{0.4672 + 0.9340}{-2\times 0.1598} = -4.3842,\ t = \frac{-1}{4.3842 + \sqrt{4.3842^2 + 1}} = -0.1126$$

$$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} = 0.9937,\quad \sin\theta = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}} = -0.1119$$

数值分析与有限元编程

$$A_5 = Q_{12}^T A_4 Q_{12}$$

$$= \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0.4672 & -0.1598 & -0.0017 \\ -0.1598 & -0.9340 & 0 \\ -0.0017 & 0 & 20.9669 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0.4851 & 0 & \boxed{0.0017} \\ 0 & -0.9520 & \boxed{-0.0002} \\ 0.0017 & -0.0002 & 20.9669 \end{bmatrix} \qquad \therefore \lambda_1 \approx 0.4851, \quad \lambda_2 \approx -0.9520, \quad \lambda_3 \approx 20.9669$$

$$Q = Q_1 Q_2 Q_3 Q_4 Q_5 = \begin{pmatrix} 0.7998 & -0.3139 & 0.5117 \\ -0.2257 & 0.6325 & 0.7408 \\ -0.6159 & -0.7147 & 0.4351 \end{pmatrix}$$

故,对应的一组单位特征向量分别为

$$x_1 = \begin{pmatrix} 0.9798 \\ -0.2257 \\ -0.6159 \end{pmatrix}, x_2 = \begin{pmatrix} -0.3139 \\ 0.6325 \\ -0.7147 \end{pmatrix}, x_3 = \begin{pmatrix} 0.5117 \\ 0.7408 \\ 0.4351 \end{pmatrix}$$

数值分析与有限元编程

实现此任务的子程序算法和功能如下：

一、功能

用雅可比(Jacobi)法求实对称矩阵的全部特征值与相应的特征向量。

二、方法说明

雅可比方法的基本思想如下。

设 实对称矩阵为 A。在非对角线元素中选取一个绝对值最大者 a_{pq}，利用平面旋转变换矩阵 $R_0(p,q,\theta)$ 对 A 作正交相似变换：

$$A_1 = R_0(p,q,\theta)^T A R_0(p,q,\theta)$$ **R_0是正交矩阵**

其中 $R_0(p,q,\theta)$ 的元素为

$$r_{pp} = \cos\theta,\quad r_{qq} = \cos\theta,\quad r_{pq} = -\sin\theta,\quad r_{qp} = \sin\theta$$

$$r_{ij} = 0,\quad i,j \neq p,q$$

如果按下式确定角度 θ：

$$
= \begin{array}{cc}
 & \begin{array}{ccc} \text{第}p\text{列} & \qquad\qquad & \text{第}q\text{列} \\ \downarrow & & \downarrow \end{array} \\
\begin{array}{c} \\ \\ \\ \text{第}p\text{行} \rightarrow \\ \\ \\ \\ \text{第}q\text{行} \rightarrow \\ \\ \\ \\ \end{array} &
\begin{bmatrix}
1 & 0 & \cdots & & & & & & & & 0 \\
0 & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & \cos\theta & & & & -\sin\theta & & & \\
 & & & \ddots & 1 & & & & & & \\
 & & & & & \ddots & & & & & \vdots \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & \sin\theta & & & & \cos\theta & & & \\
 & & & & & & & & 1 & \ddots & \\
\vdots & & & & & & & & \ddots & \ddots & 0 \\
0 & \cdots & & & & & & & \cdots & 0 & 1
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

$$\mathrm{tg}2\theta = 2a_{pq}/(a_{pp} - a_{qq})$$

则经上述变换后，非对角线元素的平方和将减少 $2a_{pq}^2$，对角线元素的平方和增加 $2a_{pq}^2$，矩阵中所有元素的平方和不变。反复进行上述变换，就可以逐步将矩阵 A 变为对角矩阵，对角线上的元素即为特征值，而每一步的平面旋转变换矩阵的乘积矩阵的第 i 列即为与第 i 个特征值对应的特征向量。

雅可比方法的基本步骤如下：

(1) 令 $S = I_n$(单位矩阵)。

(2) 选取非对角线元素中绝对值最大者 a_{pq}。

(3) 若 $|a_{pq}| < \varepsilon$，则迭代过程结束。此时，对角线元素即为特征值，即 $\lambda_i = a_{ii}(i = 1, 2, \cdots, n)$，$S$ 中的第 i 列即为与 λ_i 对应的特征向量。否则继续下一步。

(4) 计算平面旋转变换矩阵的元素及其变换后的矩阵 A_1 的元素。由如下一系列公式给出：

$$x = -a_{pq}$$

$$y = \frac{1}{2}(a_{qq} - a_{pp})$$

$$\omega = \mathrm{sign}(y) \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

$$\sin 2\theta = \omega$$

$$\sin\theta = \frac{\omega}{\sqrt{2 + (1 + \sqrt{1 - \omega^2})}}$$

$$\cos\theta = \sqrt{1 - \sin^2\theta}$$

$$a_{pp}^{(1)} = a_{pp}\cos^2\theta + a_{qq}\sin^2\theta + a_{pq}\sin 2\theta$$

$$a_{qq}^{(1)} = a_{pp}\sin^2\theta + a_{qq}\cos^2\theta - a_{pq}\sin 2\theta$$

$$a_{pq}^{(1)} = a_{qp}^{(1)} = 0$$

$$\left.\begin{aligned} a_{pj}^{(1)} &= a_{pj}\cos\theta + a_{qj}\sin\theta \\ a_{qj}^{(1)} &= -a_{pj}\sin\theta + a_{qj}\cos\theta \end{aligned}\right\} j \neq p, q$$

$$\left.\begin{aligned} a_{ip}^{(1)} &= a_{ip}\cos\theta + a_{iq}\sin\theta \\ a_{iq}^{(1)} &= -a_{ip}\sin\theta + a_{iq}\cos\theta \end{aligned}\right\} i \neq p, q$$

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}, \quad i, j \neq p, q$$

(5) $S = SR(p, q, \theta)$，转(2)。

（6）根据特征值的大小从大到小的顺序重新排列矩阵的特征值和特征向量

三、子程序语句

SUBROUTINE CJCBI(A,N,EPS,V,L)

四、形参说明

A——双精度实型二维数组，体积为N×N，输入兼输出参数。调用时存放实对称矩阵；返回时，其对角线元素即为特征值，即 $\lambda_i = a_{ii}(i = 1,2,\cdots,n)$ 。

N——整型变量，输入参数。矩阵阶数。

EPS——实型变量，输入参数。控制精度要求。

V——双精度实型二维数组，体积为N×N，输出参数。返回特征向量，第 i 列为与 λ_i 对应的特征向量。

L——整型变量，输出参数。若返回L=0，说明程序工作可能失败；若L≠0，说明正常返回。

例子： 设实对称矩阵为

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

雅克比方法求全部本征值与本征向量的 精度要求 EPS=0.001

```
PROGRAM EXAMPLE03
DIMENSION A(3,3),V(3,3)
    DOUBLE PRECISION A,V
    DATA A/2.0,-1.0,0.0,-1.0,2.0,-1.0,0.0,-1.0,2.0/
    EPS=0.001
    CALL CJCBI(A,3,EPS,V,L)
    IF (L.NE.0) THEN
       WRITE(*,20) (A(I,I),I=1,3)
    END IF
```

```
20 FORMAT(1X,3D15.6)
   WRITE(*,*)
   WRITE(*,20) ((V(I,J),J=1,3),I=1,3)
   END
```

运行结果为

```
.585786D+00     .341421D+01     .200000D+01

.500000D+00    -.500012D+00    -.707098D+00
.707107D+00     .707107D+00    -.120684D-04
.500000D+00    -.499988D+00     .707115D+00
```

本矩阵准确特征值为

$$\lambda_1 = 2 - \sqrt{2}, \quad \lambda_2 = 2 + \sqrt{2}, \quad \lambda_3 = 2.0$$

特征向量为

$$V_1 = \begin{bmatrix} 1/2 \\ \sqrt{2}/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}, \quad V_2 = \begin{bmatrix} -1/2 \\ \sqrt{2}/2 \\ -1/2 \end{bmatrix}, \quad V_3 = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ 0 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$$

```
SUBROUTINE CJCBI(A,N,EPS,V,L)
    DIMENSION A(N,N),V(N,N)
    DOUBLE PRECISION A,V,FM,CN,SN,OMEGA,X,Y
    INTEGER P,Q
    L=1
    DO 20 I=1,N
      V(I,I)=1.0
      DO 10 J=1,N
        IF (I.NE.J) V(I,J)=0.0
10    CONTINUE
20  CONTINUE
25  FM=0.0
    DO 30 I=2,N
    DO 30 J=1,I-1
      IF (ABS(A(I,J)).GT.FM) THEN
```

```
        FM=ABS(A(I,J))
        P=I
        Q=J
      END IF
30  CONTINUE
    IF (FM.LT.EPS) THEN
      L=1
      RETURN
    END IF
    IF (L.GT.100) THEN
      L=0
      RETURN
    END IF
    L=L+1
    X=-A(P,Q)
```

```
Y=(A(Q,Q)-A(P,P))/2.0

OMEGA=X/SQRT(X*X+Y*Y)

IF (Y.LT.0.0) OMEGA=-OMEGA

SN=1.0+SQRT(1.0-OMEGA*OMEGA)

SN=OMEGA/SQRT(2.0*SN)

CN=SQRT(1.0-SN*SN)

FM=A(P,P)

A(P,P)=FM*CN*CN+A(Q,Q)*SN*SN+A(P,Q)*OMEGA

A(Q,Q)=FM*SN*SN+A(Q,Q)*CN*CN-A(P,Q)*OMEGA

A(P,Q)=0.0

A(Q,P)=0.0

DO 60 J=1,N

    IF ((J.NE.P).AND.(J.NE.Q)) THEN

        FM=A(P,J)

        A(P,J)=FM*CN+A(Q,J)*SN
```

```
            A(Q,J)=-FM*SN+A(Q,J)*CN
         END IF
   60 CONTINUE

      DO 70 I=1,N
         IF ((I.NE.P).AND.(I.NE.Q)) THEN
            FM=A(I,P)
            A(I,P)=FM*CN+A(I,Q)*SN
            A(I,Q)=-FM*SN+A(I,Q)*CN
         END IF
   70 CONTINUE
      DO 80 I=1,N
         FM=V(I,P)
         V(I,P)=FM*CN+V(I,Q)*SN
         V(I,Q)=-FM*SN+V(I,Q)*CN
```

```
80  CONTINUE
    GOTO 25
    END
```