華東師範大學
EAST CHINA NORMAL UNIVERSITY

第三讲

矩阵特征值计算

—— 正交变换与QR方法

主要内容

- 特征值基本性质
- 幂法与反幂法
- 正交变换与矩阵分解
- QR 方法
- 应用：Google 网页排名

Householder 变换

定义： 设 $w \in \mathrm{R}^n$ 且 $w^T w = 1$，称矩阵

$$H_w = I - 2ww^T$$

为**Householder变换**，或**反射变换**。

- **基本性质**

(1) 对称：$H_w^T = H_w$

(2) 正交：$H_w^{-1} = H_w^T = H_w$

(3) 对合：$H_w^2 = I$

(4) 保模：$\|H_w x\|_2 = \|x\|_2$

(5) $\det(H_w) = -1$

注：若不要求 $w^T w = 1$
则 Householder 变换
定义为

$$H_w = I - \frac{2}{\|w\|_2^2} ww^T$$

Householder 变换

定理： 设 $x, y \in R^n$， $x \neq y$ 且 $\|x\|_2 = \|y\|_2$，则存在 n 阶 Householder 变换 H，使得

$$y = Hx$$

证： 取 $w = \dfrac{(x-y)}{\|x-y\|_2}$

Householder 变换

定理： 对任意的非零向量 $x \in R^n$，存在 Householder 变换 H，使得

$$Hx = \sigma e_1$$

其中 $\sigma = -\mathrm{sign}(x_1)\|x\|_2$，$e_1 = (1, 0, \ldots, 0)^T$，$H = I - \beta v v^T$

$$v = x - \sigma e_1$$

$$\beta = \frac{2}{\|v\|_2^2} = \frac{1}{\sigma(\sigma - x_1)}$$

House.m

- σ 的选取是为了防止在实际计算中 σ 与 x_1 互相抵消
- 若 $x_1=0$, 则取 $\sigma = \|x\|_2$

Givens 变换

定义：称矩阵

$$G(i,j,\theta)=\begin{array}{cc}
\begin{bmatrix}
1 &&&&&&&&&& \\
& \ddots &&&&&&&&& \\
&& 1 &&&&&&&& \\
&&& \cos(\theta) &&&& \sin(\theta) &&& \\
&&&& 1 &&&&&& \\
&&&&& \ddots &&&&& \\
&&&&&& 1 &&&& \\
&&& -\sin(\theta) &&&& \cos(\theta) &&& \\
&&&&&&&& 1 && \\
&&&&&&&&& \ddots & \\
&&&&&&&&&& 1
\end{bmatrix}
&
\begin{array}{c} \\ \\ \\ i \\ \\ \\ \\ j \\ \\ \\ \\ \end{array}
\\
\begin{array}{ccccccccccc} &&& i &&&& j &&& \end{array} &
\end{array}$$

为 Givens 变换，或 旋转变换。

Givens 变换

- **基本性质**

  (1) 只有四个元素与单位矩阵不同

  (2) 正交：$G^{-1} = G^T$

  (3) 用 G 左乘一个矩阵时，只改变该矩阵中两行的值

  (4) 用 G 右乘一个矩阵时，只改变该矩阵中两列的值

Givens 变换

定理： 设 $x = (x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, x_n)^T$，且 x_i, x_j 不全为零，则存在 Givens 变换 $G = G(i, j, \theta)$，使得

$$Gx = (x_1, \ldots, \tilde{x}_i, \ldots, 0, \ldots, x_n)^T$$

QR 分解

定理：（QR 分解）

设 n 阶实矩阵 A 非奇异，则存在正交分解

$$A = QR$$

其中 Q 是正交矩阵， R 是非奇异上三角矩阵 。

若限定 R 的对角线元素为正数，则此分解唯一 。

可通过Gram-Schmidt 正交化过程实现

QR 分解算法

- **算法（QR 分解）**

考虑到稳定性，采用Householder变换

设 $A=[a_1,a_2,\dots,a_n],\ \ a_j=[a_{1j},a_{2j},\dots,a_{nj}]^T$ （ j = 1, ... , n ）

(1) 构造 H_1 使得 $H_1 a_1=\sigma_1 e_1$，令

$$A_2=H_1A=H_1[a_1,a_2,\dots,a_n]=\begin{bmatrix}\sigma_1 & a_{12}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)}\\ 0 & \boxed{a_{22}^{(2)}} & \cdots & a_{2n}^{(2)}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)}\end{bmatrix}$$

$$\boxed{a_2^{(2)}}$$

(2) 构造 $\widetilde{H}_2$ 使得 $\widetilde{H}_2 a_2^{(2)}=\sigma_2\tilde{e}_1$，令

$$H_2=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \widetilde{H}_2\end{bmatrix} \Longrightarrow A_3=H_2A_2=\begin{bmatrix}\sigma_1 & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)}\\ 0 & \sigma_2 & a_{23}^{(3)} & \cdots & a_{2n}^{(3)}\\ 0 & 0 & \boxed{a_{33}^{(3)}} & \cdots & a_{3n}^{(3)}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)}\end{bmatrix}$$

QR 分解算法

以此类推，经过 n-1 步，可得 Householder 矩阵 $H_1, H_2, \dots,$ H_{n-1}，使得

$$H_{n-1}H_{n-2}\cdots H_1 A = \begin{bmatrix} \sigma_1 & a_{12}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & a_{2n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n \end{bmatrix} = R$$

令 $Q = \left(H_{n-1}H_{n-2}\cdots H_1\right)^{-1} = H_1 H_2 \cdots H_{n-1}$，即得

$$A = QR$$

QR分解的运算量：约 $\frac{4}{3}n^3$

QR 分解举例

例： 用 Householder 变换计算 $A=\begin{bmatrix}0 & 2 & 0\\ 2 & 1 & 2\\ 0 & 2 & 1\end{bmatrix}$ 的 QR 分解

解： (板书)

$$u = x - \sigma e_1 \qquad \sigma = -\mathrm{sign}(x_1)\|x\|_2$$

$$H = I - \beta v v^T \qquad \beta = \frac{1}{\sigma(\sigma - x_1)}$$

$$HA = A - \beta v v^T A = A - (\beta v)(v^T A)$$

节省运算量

实 Schur 分解

定理：（实 Schur 分解）

设 A 为 n 阶实矩阵，则存在正交矩阵 Q，使得

$$Q^T AQ = R = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & \cdots & R_{1m} \\ & R_{22} & \cdots & R_{2m} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & R_{mm} \end{bmatrix}$$

拟上三角矩阵

其中 R_{ii} 是一阶或二阶方阵。

- 若 R_{ii} 是一阶方阵，则它就是 A 的**特征值**；
- 若 R_{ii} 是二阶方阵，则其特征值为 A 的两个**共轭复特征值**。

QR 迭代

QR 迭代算法

- 计算矩阵的所有特征值和特征向量
- 计算过程

(1) 令 $A_1 = A$

(2) 对 $k = 1, 2, \ldots,$

计算 A_k 的 QR 分解 $A_k = Q_k R_k$

计算 $A_{k+1} = R_k Q_k$

直到 A_{k+1} 收敛到一个 拟上三角阵

优点：可以计算所有特征值和特征向量
缺点：收敛慢，运算太大，约 $O(n^4)$

实用的 QR 迭代

- **实用的 QR 迭代算法**
  - **先采用 Householder 变换，通过相似变换，将矩阵 A 转化为上 Hessenberg 矩阵 H，运算量 $O(n^3)$**
  - **对 H 进行隐式 QR 迭代，每步运算量 $O(n^2)$**
  - **选择适当的位移策略，对算法进行加速，这样平均2到3步就能收敛到一个特征值，因此总迭代步数约 $2n$ 到 $3n$**

将总运算量从 $O(n^4)$ 降到 $O(n^3)$

具体实施细节可参见相关文献

MATLAB计算特征值

■ 用 Maltab自带函数 计算特征值

- 计算所有特征值和特征向量：eig

```
E=eig(A);
```

E 中包含 A 的所有特征值

```
[V,D]=eig(A);
```

D 为 A 的所有特征值组成的对角阵，
V 为相应的特征向量组成的矩阵，即 AV=VD

- 大规模稀疏矩阵的部分特征值和特征向量：eigs