第七章-特征值和特征向量

(1)：幂法

目录

计算特征值

计算特征值是一个基础的计算问题：

- 对于证明、理解矩阵迭代法的收敛性
- 物理领域，计算系统的基态被建模为计算最小特征值对应的特征向量

  $$\boldsymbol{H}\psi = E\psi$$

  其中 $\boldsymbol{H}$ 是一个算子/矩阵，E 是特征值（也是能量），ψ 是特征向量（代表状态）
- $\ldots$

请回顾讲义第三章（3）中的特征值部分

若 n 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有特征值 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i = \lambda_i \boldsymbol{x}_i$，其中 $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$，考虑某个初始向量 $\boldsymbol{v}_0 = \sum_i a_i \boldsymbol{x}_i$，则

$$\boldsymbol{A}^k \boldsymbol{v}_0 = \underline{\qquad\qquad}$$

若 $|\lambda_1| > |\lambda_2|$，则当 k 很大时候，

$$\boldsymbol{A}^k \boldsymbol{v}_0 \text{ 可以近似为} \underline{\qquad\qquad}?$$

目录

幂法

幂法可以帮助我们计算**绝对值最大的特征值和对应的特征向量**：

通过迭代法不断计算 $\boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_{k-1}$，即 $\boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{A}^k\boldsymbol{v}_0$，我们可以验证：

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\boldsymbol{v}_k}{\lambda_1^k} = a_1\boldsymbol{x}_1$$

因此，

$$\begin{cases} \lim\limits_{k\to\infty} \dfrac{\boldsymbol{v}_k}{\|\boldsymbol{v}_k\|} = \boldsymbol{A} \text{ 对应于}\lambda_1\text{的某个特征向量} \\ \lim\limits_{k\to\infty} \dfrac{(\boldsymbol{v}_{k+1})_i}{(\boldsymbol{v}_k)_i} = \lambda_1 \end{cases}$$

其中，收敛速度由 $\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$ 来决定。

提示：若主特征值为重根 $\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_r$，且 $|\lambda_r| > |\lambda_{r+1}| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$，结论依旧成立（参见定理 9.5）

浮点问题

当 $|\lambda_1| > 1$ 时，或 $|\lambda_1| < 1$ 时，计算 $\boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{A}^k \boldsymbol{v}_0$ 会有浮点问题。

问题：怎么办?

规范化的幂法

我们可以通过规范化向量来避免：初始选 $\boldsymbol{v}_0 = \boldsymbol{u}_0$，

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{v}_1 &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_0, & \boldsymbol{u}_1 &= \frac{\boldsymbol{v}_1}{\max(\boldsymbol{v}_1)} \\
\boldsymbol{v}_2 &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_1, & \boldsymbol{u}_2 &= \frac{\boldsymbol{v}_2}{\max(\boldsymbol{v}_2)} \\
&\vdots & &\vdots \\
\boldsymbol{v}_k &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_{k-1}, & \boldsymbol{u}_k &= \frac{\boldsymbol{v}_k}{\max(\boldsymbol{v}_k)}
\end{aligned}
$$

其中 $\max(\boldsymbol{v})$ 是指向量中的绝对值最大的那个值。通过找规律可知

$$
\boldsymbol{v}_k = \frac{\boldsymbol{A}^k \boldsymbol{v}_0}{\max\left(\boldsymbol{A}^{k-1}\boldsymbol{v}_0\right)}, \qquad \boldsymbol{u}_k = \frac{\boldsymbol{A}^k \boldsymbol{v}_0}{\max\left(\boldsymbol{A}^k \boldsymbol{v}_0\right)}
$$

定理

通过前一页的规范化的幂法，

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{u}_k = \frac{\boldsymbol{x}_1}{\max \boldsymbol{x}_1};$$

$$\lim_{k\to\infty} \max(\boldsymbol{v}_k) = \lambda_1$$

目录

原点平移加速法

我们构造 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A} - p\boldsymbol{I}$，则 $\boldsymbol{B}$ 的特征值为 $\lambda_1 - p, \lambda_2 - p, \cdots, \lambda_n - p$，特征向量不变。

我们还是希望计算 λ_1，因此我们需要

$$|\lambda_i - p| < |\lambda_1 - p|, \qquad i = 2, 3, \cdots, n. \tag{1}$$

为实现加速，我们希望找到 p 满足

$$\max_{i=2,3,\cdots n} \left| \frac{\lambda_i - p}{\lambda_1 - p} \right| < \max_{i=2,3,\cdots n} \left| \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right|$$

对此，我们引入一个符号：

$$\omega(p) := \max_{i=2,3,\cdots n} \left| \frac{\lambda_i - p}{\lambda_1 - p} \right|$$

我们希望找到 p 使得 $\omega(p) < 1$，且 $\omega(p)$ 越小越好。

例题： 假设 $\boldsymbol{A}$ 有特征值 $\lambda_j = 15 - j$ $(j = 1, 2, 3, 4)$，则收敛速度

$$\omega(0) = \frac{13}{14} \approx 0.93,$$

但我们若平移 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A} - p\boldsymbol{I}$，并且取 $p = 12$，则收敛速率

$$\omega(p) = \frac{1}{2} < 0.93.$$

该方法的优势：有机会能加速收敛。

该方法的局限性：取决于对于问题的特征值的大致了解。

Rayleigh 商法

定理

假设 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，$\boldsymbol{u}_k$ 为规范化的幂法得到的向量，则

$$\frac{\langle \boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_k \rangle}{\langle \boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{u}_k \rangle} = \lambda_1 + \mathcal{O}\left((\lambda_2/\lambda_1)^{(2k)} \right)$$

目录

反幂法

假设 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，且特征值标记为 $|\lambda_1| \geqslant |\lambda_2| \geqslant \cdots \geqslant |\lambda_n|$（对应的特征向量为 $\boldsymbol{x}_i$）。幂法可以帮助我们计算 λ_1；但如果我们想计算 λ_n 怎么办?

思路：将幂法应用于 $\boldsymbol{A}^{-1}$

任取初始向量 $\boldsymbol{v}_0 = \boldsymbol{u}_0 \neq \mathbf{0}$，构造向量序列

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{u}_{k-1} & \text{(此处通过解线性方程组}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{u}_{k-1}\text{得到)} \\ \boldsymbol{u}_k = \dfrac{\boldsymbol{v}_k}{\max(\boldsymbol{v}_k)} \end{cases}$$

最终，$\lim\limits_{k\to\infty} \boldsymbol{u}_k = \dfrac{\boldsymbol{x}_n}{\max\left(\boldsymbol{x}_n\right)}$，$\lim\limits_{k\to\infty} \max\left(\boldsymbol{v}_k\right) = \dfrac{1}{\lambda_n}$

问题：对此，收敛速度由什么比值确定? ________

反幂法 + 原点平移法

定理 (定理 9.9)

假设

1° $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 有 n 个线性无关的特征向量，$\boldsymbol{A}$ 的特征值及对应的特征向量记作 λ_i 及 $\boldsymbol{x}_i$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$,

2° p 为 λ_j 的近似值, $(\boldsymbol{A} - p\boldsymbol{I})^{-1}$ 存在, 且 $|\lambda_j - p| < |\lambda_i - p| \quad (i \neq j)$,

3° $\boldsymbol{u}_0 = \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{x}_i \neq \mathbf{0}$ 为给定的初始向量 $(a_j \neq 0)$,

则由反幂法迭代公式构造的向量序列 $\{\boldsymbol{v_k}\}, \{\boldsymbol{u_k}\}$ 满足

$$\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{u}_k = \frac{\boldsymbol{x}_j}{\max(\boldsymbol{x}_j)}, \qquad \lim_{k\to\infty} \max(\boldsymbol{v}_k) = \frac{1}{\lambda_j - p}, \quad \text{即 } p + \frac{1}{\max(\boldsymbol{v}_k)} \to \lambda_j,$$

收敛速度由比值 $r = \max_{i\neq j} \left|\frac{\lambda_j - p}{\lambda_i - p}\right|$ 确定。可参考例题 9.4

目录

方法	应用	备注
幂法	求解主特征值	
原点平移加速法	通过平移 p 来提高收敛速度	确定 p 值需要对特征值分布有一定了解
Rayleigh 商	加速主特征值的求解	针对 $\boldsymbol{A}$ 对称的情况
反幂法	求绝对值意义下最小特征值	
反幂法 + 原点平移法	可以求任何特征值和特征向量	确定 p 需要一定信息