非对称特征值问题的计算方法

教师: 胡俊

北京大学数学科学学院

December 24, 2020

目录

目录

基本概念和性质

1. 特征向量
2. 特征值
3. 特征多项式
4. 谱集
5. 代数重数，几何重数
6. 单特征值， 半单特征值
7. 相似变换
8. Jordan分解定理， Jordan标准型， Jordan块

定理(Shur分解定理) 设$A \in C^{n\times n}$, 则存在酉矩阵$U \in C^{n\times n}$使得

$$U^*AU = T$$

其中T是上三角阵；而且可以适当选取U, 可使T的对角元按照任意指定的顺序排列.

定理(Gerschgorin圆盘定理) 设$A = [a_{ij}] \in C^{n\times n}$, 令

$$G_i(A) = \{z \in C : |z - a_{ii}| \le \sum_{j\ne i} |a_{ij}|\}, i = 1, \cdots, n,$$

则

$$\lambda(A) \subset G_1(A) \cup G_2(A) \cup \cdots \cup G_n(A).$$

假定λ是A的一个单特征值，x是属于特的单位特征向量.
令$U = [x, U_2] \in C^{n\times n}$是酉矩阵（$U^*U = I$），即$U$的列向量构成$C^n$的一组标准正交基，则有

$$U^*AU = \begin{bmatrix} \lambda & x^*AU_2 \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}$$

其中$A_2 = U_2^*AU_2$是$n-1$阶矩阵. 由λ是A的单特征值的假定，有

$$\delta = \min_{\mu\in\lambda(A_2)} |\lambda - \mu| > 0.$$

于是，定义

$$B^{\perp} = U_2(\lambda I - A_2)^{-1}U_2^*.$$

此外，由于$\det(\lambda I - A^T) = \det(\lambda I - A) = 0$, 故必存在非零向量$y \in C^n$, 使得$y^T A = \lambda y^T$. 通常称$y$为$A$的属于$\lambda$的左特征向量. 因为$\lambda$ 是单特征值，因此$y^T x \neq 0$, 故可选择y使得$y^T x = 1$. 若给矩阵以微小的扰动使其变为$\tilde{A}$, 记$\epsilon = \|\tilde{A} - A\|_2$,则存在$\tilde{A}$的一个特征值$\tilde{\lambda}$和对应的特征向量$\tilde{x}$, 使得

$$|\tilde{\lambda} - \lambda| \leq \|y\|_2 \epsilon + O(\epsilon^2), \quad \|\tilde{x} - x\|_2 \leq \|B^{\perp}\|_2 \epsilon + O(\epsilon^2).$$

分别称称$\|y\|_2$和$\|B^{\perp}\|_2$为特征值λ和特征向量x的条件数，记作

$$\kappa(\lambda) = \|y\|_2, \quad \kappa(x) = \|B^{\perp}\|_2.$$

目录

幂法

我们假设A可以对角化

$$A = X\Lambda X^{-1},$$

其中$\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$, $X = [x_1, \cdots, x_n] \in C^{n\times n}$非奇异. 再假定

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|.$$

给定任何向量

$$u_0 = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_n x_n,$$

其中$a_1 \neq 0$. 我们有

$$\begin{aligned} A^k u_0 &= \sum_{j=1}^{n} a_j A^k x_j = \sum_{j=1}^{n} a_j \lambda_j^k x_j \\ &= \lambda_1^k \left[a_1 x_1 + \sum_{j=2}^{n} a_j \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1}\right)^k x_j \right]. \end{aligned}$$

由此知

$$\lim_{k\to\infty}\frac{A^k u_0}{\lambda_1^k}=a_1x_1.$$

这表明

$$u_k=\frac{A^k u_0}{\lambda_1^k}$$

就是A的一个很好的近似特征向量.

实际上，上述算法行不通：一是λ_1是事先不知道的；二计算A^k的计算量太大.

主要思想：一是λ_1^k只是改变向量的长度，可以用其他的常数改变向量的长度；二计算$A^k u_0$时没有必要提前将A^k计算出来.

$$
\begin{aligned}
y_k &= Au_{k-1}, \\
\mu_k &= \xi_j^{(k)}, \xi_j^{(k)} \text{ 是} y_k \text{的模最大分量}, \\
u_k &= y_k/\mu_k,
\end{aligned}
$$

其中u_0是任意给定的初始向量，且$\|u_0\|_\infty = 1$.

定理： 设A有p个互不相同的特征值满足$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_p|$, 并且模最大特征值$\lambda_1$是半单的. 如果初始向量$u_0$在$\lambda_1$ 的特征子空间上的投影不是零，则上述迭代产生的向量序列$\{u_k\}$收敛到λ_1的一个特征向量x_1, 而且产生的数值序列$\{\mu_k\}$收敛到λ_1.

证明： 有Jordan分解定理

$$
A = X\mathrm{diag}(J_1, \cdots, J_p)X^{-1}
$$

其中$J_i \in C^{n_i \times n_i}$是属于$\lambda_i$的Jordan块构成的块上三角阵，$n_1 + n_2 + \cdots + n_p = n$. 而且$\lambda_1$为半单的，因此$J_1 = \lambda_1 I_{n_1}$.

令$y = X^{-1}u_0$, 并将y和X作如下分块:

$$y = (y_1^T, y_2^T, \cdots, y_p^T), X = [X_1, X_2, \cdots, X_p],$$

这样

$$\begin{aligned} A^k u_0 &= X\mathsf{diag}(J_1^k, J_2^k, \cdots, J_p^k)X^{-1}u_0 \\ &= X_1 J_1^k y_1 + X_2 J_2^k y_2 + \cdots + X_p J_p^k y_p \\ &= \lambda_1^k X_1 y_1 + X_2 J_2^k y_2 + \cdots + X_p J_p^k y_p \\ &= \lambda_1^k \left[X_1 y_1 + X_2 \left(\frac{J_2}{\lambda_1}\right)^k y_2 + \cdots + X_p \left(\frac{J_p}{\lambda_1}\right)^k y_p \right]. \end{aligned}$$

注意到$\rho(\lambda_1^{-1}J_i) = |\lambda_i|/|\lambda_1| < 1 (i = 2, \cdots, p)$, 知

$$\lim_{k\to\infty} \frac{1}{\lambda_1^k} A^k u_0 = X_1 y_1.$$

而且假定u_0在λ_1的特征子空间上投影不为零蕴涵$X_1 y_1 \neq 0$.

因为$\|u_k\|_\infty = 1$且

$$u_k = \frac{Au_{k-1}}{\mu_k} = \frac{A^k u_0}{\mu_k \mu_{k-1} \cdots \mu_1},$$

并且u_k至少有一个分量为1，于是

$$\xi_k = \mu_k \mu_{k-1} \cdots \mu_1$$

必为$A^k u_0$的一模最大分量，从而ξ_k/λ_1^k就是$A^k u_0/\lambda_1^k$的一个模最大分量. 这样

$$\xi = \lim_{k\to\infty} \xi_k/\lambda_1^k$$

存在，从而$\{u_k\}$收敛，且

$$\lim_{k\to\infty} u_k = \lim_{k\to\infty} \frac{A^k u_0}{\xi_k}$$
$$= \lim_{k\to\infty} \left(\frac{A^k u_0}{\lambda_1^k} \Big/ \frac{\xi_k}{\lambda_1^k} \right)$$
$$= \frac{X_1 y_1}{\xi} = x_1.$$

显然x_1是属于λ_1的一个特征向量. 再有等式$Au_{k-1} = \mu_k u_k$及x_1有一个模为1的分量，立即可得序列$\{\mu_k\}$收敛到λ_1.

目录

反幂法

$$\begin{aligned} Ay_k &= z_{k-1}, \\ \mu_k &= \xi_j^{(k)}, \xi_j^{(k)} \text{ 是} y_k \text{的模最大分量}, \\ z_k &= y_k/\mu_k, \end{aligned}$$

带位移的反幂法

$$\begin{aligned} (A-\mu I)v_k &= z_{k-1}, \\ z_k &= v_k/\|v_k\|_2. \end{aligned}$$

假定A的特征值排序为

$$0 < |\lambda_1 - \mu| < |\lambda_2 - \mu| \le |\lambda_3 - \mu| \le \cdots \le |\lambda_n - \mu|.$$

假定λ是A的一个单特征值，x是属于λ的单位特征向量，并且假定迭代格式中的位移μ和λ十分靠近，且x是良态的，即cond(x)不是太大. 现取$U_2 \in C^{n\times n-1}$, 使得$[x, U_2]$是酉阵, 即U_2的列span$\{x\}^{\perp}$的标准正交基.

由条件数的定义知

$$\mathrm{cond}(x) = \|U_2(\lambda I - A_2)^{-1}U_2^*\|_2 = \|(\lambda I - A_2)^{-1}U_2^*\|_2$$

其中$A_2 = U_2^* A U_2$.

现假定给定z_0之后，我们用列主元Gauss消去法求解方程$(A - \mu I)v_1 = z_0$的. 记计算解为$\hat{v}_1$

$$(A - \mu I - E)\hat{v}_1 = z_0.$$

其中E与$A - \mu I$和z_0有关，但$\|E\|_2$有一致的上界，通常差不多是机器精度. 记$e = \hat{v}_1 - v_1 = (A - \mu I)^{-1}E\hat{v}_1$, 并将$e$ 分解为

$$e = x_1 + x_2$$

其中$x_1 \in \mathrm{span}\{x\}$, $x_2 \in \mathrm{span}\{x\}^{\perp}$, 则存在$\alpha \in C$和$y \in C^{n-1}$，使得

$$x_1 = \alpha x, x_2 = U_2 y.$$

另一方面，我们有

$$A-\mu I=[x,U_2]\begin{bmatrix}\lambda-\mu & x^*AU_2\\ 0 & A_2-\mu I\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x^*\\ U_2^*\end{bmatrix}.$$

因而

$$(A-\mu I)^{-1}=[x,U_2]\begin{bmatrix}\frac{1}{\lambda-\mu} & \frac{-1}{\lambda-\mu}x^*AU_2(A_2-\mu I)^{-1}\\ 0 & (A_2-\mu I)^{-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x^*\\ U_2^*\end{bmatrix}.$$

这样

$$\begin{aligned}\alpha &= x^*e = x^*(A-\mu I)^{-1}E\hat{v}_1\\ &= \frac{x^*}{\lambda-\mu}[I-AU_2(A_2-\mu I)^{-1}U_2^*]E\hat{v}_1,\\ y &= U_2^*e=(A_2-\mu I)^{-1}U_2^*E\hat{v}_1.\end{aligned}$$

注意到

$$
\begin{aligned}
(A_2 - \mu I)^{-1} &= (A_2 - \lambda I + (\lambda - \mu) I)^{-1} \\
&= (I + (\lambda - \mu)(A_2 - \lambda I)^{-1})^{-1}(A_2 - \lambda I)^{-1}.
\end{aligned}
$$

我们知道, 当μ和λ十分靠近时，有

$$
s = \|(A_2 - \mu I)^{-1} U_2^*\|_2 \approx \|(A_2 - \lambda I)^{-1}\|_2 = \mathsf{cond}(x).
$$

因此，在x是良态的条件小，s不会太大. 于是

$$
\|x_2\|_2 = \|y\|_2 \leq s\|E\hat{v}_1\|_2
$$

就是一个不太大的量，但是

$$
|\alpha| \leq \frac{1}{|\lambda - \mu|}(1 + \|A\|_2 s)\|E\hat{v}_1\|_2,
$$

就是一个很大的量.

换句话说，求解线性方程组所引起的误差，主要对其解在特征子空间span$\{x\}$上投影的长度有影响，误差越大，其解在特征子空间span$\{x\}$上的投影越大. 这对于我们要计算λ的近似特征向量而言，十分有利，因为我们关心的主要是得到向量的方向而并非它的大小.

达到机器精度的近似特征值 μ: $\det(A+E-\mu I)=0$, $\|E\|_2=O(u)$

达到机器精度的近似特征值向量 y: $(A+F)y=\mu y$, $\|F\|_2=O(u)$

若μ是A的一个达到机器精度的近似特征值，则存在E满足$\|E\|_2=O(u)$, 且$(A+E-\mu I)y=0$有非零解. 设$y\in C^n$满足

$$(A+E-\mu I)y=0,\ 且\|y\|_2=1.$$

那么我们有

$$(A+E)y=\mu y\ 且\|E\|_2=O(u).$$

即y是A的一个达到机器精度的近似特征向量. 换句话说，若我们在带位移的反幂法中取$z_0 = (A - \mu I)y$, 那么在精确计算的前提下，只需要迭代一次就可得到A 的到达机器精度的近似特征向量. 当然，在实际计算时我们是不会按照这种方式选取初始向量z_0的，这里只是说明一个道理，即在适当选取初始向量之后，反幂法具有“一次迭代”性.

“半次迭代法”选初值:

$$A - \mu I = LU.$$

$$LUv_1 = z_0$$

选$z_0 = Le$, 其中e为分量全为1的向量，则为了求v_1, 只要求解一个三角方程

$$Uv_1 = e.$$

目录

基本迭代与收敛性

对于给定的$A_0 = A \in C^{n\times n}$, QR算法的基本迭代格式如下：$A_0 = A \in C^{n\times n}$

$$A_{m-1} = Q_m R_m, A_m = R_m Q_m,$$

$m = 1, 2, \cdots$ 于是

$$A_m = R_m Q_m = Q_m^* Q_m R_m Q_m = Q_m^* A_{m-1} Q_m,$$

即A_m与A_{m-1}相似，具有相同的特征值. 近一步，由

$$A_m = Q_m^* Q_m R_m Q_m = Q_m^* Q_{m-1}^* \cdots Q_1^* A_0 Q_1 \cdots Q_{m-1} Q_m,$$

知A_m与$A_0 = A$相似，具有相同的特征值. 令

$$\tilde{Q}_m = Q_1 \cdots Q_{m-1} Q_m,$$

得

$$A_m = \tilde{Q}_m^* A_0 \tilde{Q}_m.$$

又

$$A_m = Q_{m+1} R_{m+1},$$

得

$$Q_{m+1} R_{m+1} = \tilde{Q}_m^* A \tilde{Q}_m, \text{ 即} \tilde{Q}_m Q_{m+1} R_{m+1} = A \tilde{Q}_m.$$

于是, 有（两边同乘以$R_m \cdots R_1$）

$$\tilde{Q}_m Q_{m+1} R_{m+1} R_m \cdots R_1 = A \tilde{Q}_m R_m \cdots R_1.$$

令$\tilde{R}_k = R_k \cdots R_1$, 得

$$\tilde{Q}_{m+1} \tilde{R}_{m+1} = A \tilde{Q}_m \tilde{R}_m = \cdots = A^{m+1}.$$

上式两边同乘以e_1, 得

$$A^{m+1} e_1 = \tilde{Q}_{m+1} \tilde{R}_{m+1} e_1 = r_{11} q_1^{m+1},$$

其中q_1^{m+1}为$\tilde{Q}_{m+1}$的第一列, r_{11}为$\tilde{R}_{m+1}$的第一个对角线元素.

定理： 设A的n个特征值满足$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| > 0$, 并设$n$阶方阵$Y$的第$i$行是$A$对应于$\lambda_i$ 的左特征向量. 如果Y有LU分解, 则迭代格式产生的矩阵$A_m = [\alpha_{ij}^{(m)}]$的对角线以下的元素趋于零, 同时对角元$\alpha_{ii}^{(m)}$趋向于$\lambda_i$ $(i = 1, \cdots, n)$.

证明： 令

$$X = Y^{-1}, \Lambda = \mathsf{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_n),$$

则有$A = X\Lambda Y$. 假定Y有LU分解为$Y = LU$, 其中L是单位下三角矩阵, U是上三角矩阵. 这样，有

$$\begin{aligned} A^m &= X\Lambda^m Y = X\Lambda^m LU = X(\Lambda^m L\Lambda^{-m})\Lambda^m U \\ &= X(I + E_m)\Lambda^m U, \end{aligned}$$

其中$I + E_m = \Lambda^m L\Lambda^{-m}$. 由于$L$是单位下三角矩阵, 且$|\lambda_i| < |\lambda_j|(i > j)$, 有

$$\lim_{m\to\infty} E_m = 0.$$

令$X = QR$且R的对角线元素均为正数. 于是

$$A^m = QR(I + E_m)\Lambda^m U = Q(I + RE_mR^{-1})R\Lambda^m U.$$

当m充分大时, $I + RE_mR^{-1}$是非奇异的, 有如下QR分解:

$$I + RE_mR^{-1} = \hat{Q}_m\hat{R}_m,$$

其中$\hat{R}_m$的对角元均为正数, 且有

$$\lim_{m\to\infty}\hat{Q}_m = \lim_{m\to\infty}\hat{R}_m = I.$$

因此

$$A^m = Q\hat{Q}_m\hat{R}_mR\Lambda^m U = (Q\hat{Q}_m)(\hat{R}_mR\Lambda^m U).$$

这样, 我们得到A^m的一个QR分解. 为了保证这一分解中上三角矩阵的对角元均为正, 定义

$$D_1 = \mathrm{diag}(\frac{\lambda_1}{|\lambda_1|}, \cdots, \frac{\lambda_n}{|\lambda_n|}),$$

$$D_2 = \mathrm{diag}(\frac{u_{11}}{|u_{11}|}, \cdots, \frac{u_{nn}}{|u_{nn}|}).$$

$$A^m = (Q\hat{Q}_m D_1^m D_2)(D_2^{-1} D_1^{-m} \hat{R}_m R \Lambda^m U).$$

注意到A^m的QR分解的唯一性, 有

$$\tilde{Q}_m = Q\hat{Q}_m D_1^m D_2, \tilde{R}_m = D_2^{-1} D_1^{-m} \hat{R}_m R \Lambda^m U.$$

于是

$$A_m = \tilde{Q}_m^* A \tilde{Q}_m = D_2^* (D_1^m)^* \hat{Q}_m^* Q^* A Q \hat{Q}_m D_1^m D_2.$$

又

$$A = X \Lambda Y = Q R \Lambda R^{-1} Q^*,$$

得

$$A_m = D_2^* (D_1^m)^* \hat{Q}_m^* R \Lambda R^{-1} \hat{Q}_m D_1^m D_2.$$

这就证明了结论.

目录

子空间迭代方法

记$\mathbf{X}_0=[x_1^{(0)},x_2^{(0)},\cdots,x_p^{(0)}]$, 基本迭代格式为

$$\mathbf{X}_k=A\mathbf{X}_{k-1}.$$

假定A得特征值满足:

$$|\lambda_1|\geq|\lambda_2|\geq\cdots\geq|\lambda_p|>|\lambda_{p+1}|\geq\cdots\geq|\lambda_n|,$$

相应特征向量为$v_1,\cdots,v_p,v_{p+1},\cdots,v_n$, 则$\mathbf{X}_k$的列向量张成的子空间收敛于

$$\mathrm{span}\{v_1,\cdots,v_p\}.$$

子空间迭代方法:

(1) 选取一个$n\times p$的矩阵$\mathbf{X}_0$, $k=1$;

(2) $\mathbf{X}_{k-1}=\hat{Q}_kR_k$;

(3) $\mathbf{X}_k=A\hat{Q}_k$.

目录

实 Schur 标准形

对于实矩阵的，自然希望设计只涉及实数运算的 QR 迭代，即给定 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，令$A_1 = A$，构造迭代格式:

$$\begin{aligned} A_k &= Q_k R_k, \\ A_{k+1} &= R_k Q_k, \end{aligned} \qquad k = 1, 2, \cdots, \tag{6.1}$$

其中 Q_k 是正交矩阵，R_k 是上三角阵. 由于复共轭特征值的存在，A_k不一定趋于上三角阵，而会趋于如下标准形.

定理(实 Schur 分解): 设$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，则存在正交矩阵$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，使得

$$Q^T A Q = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & \cdots & R_{1m} \\ & R_{22} & \cdots & R_{2m} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & R_{mm} \end{bmatrix}, \tag{6.2}$$

其中R_{ii} 或者是一个实数，或者是一个具有一对复共轭特征值的2阶方阵.

目录

上 Hessenberg 化

为了减少每次迭代所需的运算量，总是先将原矩阵 A 经相似变换约化为一个准上三角阵，再对约化后的矩阵进行 QR 迭代. 希望计算一个非奇异矩阵 Q，使得

$$\widetilde{A} = QAQ^{-1}$$

具有某种特殊形式. 当然$\widetilde{A}$ 的零元素越多越好.

用 Householder 变换做变化:

$$H_1AH_1.$$

为了保证已在 H_1A 的第一列所出现的零元素不至于在右乘 H_1 时被破坏掉，我们应选取 H_1 具有如下形状:

$$\begin{array}{cc} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widetilde{H}_1 \end{bmatrix} & \begin{array}{c} 1 \\ n-1 \end{array} \\ \begin{array}{cc} 1 & \quad n-1 \end{array} & \end{array} . \tag{7.1}$$

利用形如 (7.1) 式的 Householder 变换对 A 进行相似变换即有

$$\begin{bmatrix} \alpha_{11} & a_2^T \widetilde{H}_1 \\ \widetilde{H}_1 a_1 & \widetilde{H}_1 A_{22} \widetilde{H}_1 \end{bmatrix}, \tag{7.2}$$

其中 $a_1^T = (\alpha_{21}, \alpha_{31}, \cdots, \alpha_{n1})$, $a_2^T = (\alpha_{12}, \alpha_{13}, \cdots, \alpha_{1n})$, A_{22} 是 A 的右下角的 $n-1$ 阶主子阵.

由 (7.2) 式, Householder 变换 $\widetilde{H}_1$ 的最佳选择应该使得

$$\widetilde{H}_1 a_1 = p e_1, \tag{7.3}$$

其中 $p \in \mathbb{R}$, e_1 是 $n-1$ 阶单位矩阵的第一列. 这样一来, 就可选取形如 (7.1) 式的 Householder 变换 H_1, 使得 $H_1 A H_1$ 的第一列有 $n-2$ 个零元素.

然后, 对 $\widetilde{A}_{22} = \widetilde{H}_1 A_{22} \widetilde{H}_1$ 进行同样的考虑, 又可找到 Householder 变换

$$\widetilde{H}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widehat{H}_2 \end{bmatrix},$$

使得

$$(\widetilde{H}_2 \widetilde{A}_{22} \widetilde{H}_2) e_1 = \begin{bmatrix} * \\ * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

于是，令

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \widetilde{H}_2 \end{bmatrix},$$

即有

$$H_2 H_1 A H_1 H_2 = \left[\begin{array}{cc|c} h_{11} & h_{12} & \\ h_{21} & h_{22} & * \\ 0 & h_{32} & \\ \hline \multicolumn{2}{c|}{\mathbf{0}} & * \end{array}\right].$$

如此进行 $n-2$ 步，就可找到 $n-2$ 个 Householder 变换$H_1, \cdots, H_{n-2}$，使得

$$H_{n-2} \cdots H_1 A H_1 \cdots H_{n-2} = H,$$

其中 $H=[h_{ij}]$ 满足

$$h_{ij}=0, \quad i>j+1,$$

即

$$H=\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \cdots & h_{1,n-1} & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \cdots & h_{2,n-1} & h_{2n} \\ & h_{32} & h_{33} & \cdots & h_{3,n-1} & h_{3n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & & h_{n,n-1} & h_{nn} \end{bmatrix}. \tag{7.4}$$

通常称形如 (7.4) 式的矩阵为上 **Hessenberg** 矩阵. 现在令

$$Q_0=H_1H_2\cdots H_{n-2},$$

则有

$$Q_0^TAQ_0=H. \tag{7.5}$$

通常称分解式 (7.5) 为 A 的上 **Hessenberg** 分解.

Algorithm 1 (计算上 Hessenberg 分解: 上 Hessenberg 变换法)

for $k = 1 : n-2$

  $[v, \beta] =$ **house**$(A(k+1:n, k))$

  $A(k+1:n, k:n) = (I - \beta vv^T)A(k+1:n, k:n)$

  $A(1:n, k+1:n) = A(1:n, k+1:n)(I - \beta vv^T)$

end

这一算法计算出的上 Hessenberg 矩阵就存放在 A 所对应的存储单元内, 运算量为 $10n^3/3$; 如果需要累积 $Q_0 = H_1 \cdots H_{n-2}$, 则还需要再增加运算量 $4n^3/3$.

定理: 设$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 有如下两个上 Hessenberg 分解:

$$U^T AU = H, \quad V^T AV = G, \tag{7.6}$$

其中 $U = [u_1, u_2, \cdots, u_n]$ 和 $V = [v_1, v_2, \cdots, v_n]$ 是 n 阶正交矩阵, $H = [h_{ij}]$ 和 $G = [g_{ij}]$ 是上 Hessenberg 矩阵. 若 $u_1 = v_1$, 而且 H 的次对角元 $h_{i+1,i}$ 均不为零, 则存在对角元均为1 或-1 的对角阵 D, 使得

$$U = VD, \quad H = DGD. \tag{7.7}$$

证明: 假定对某个 m $(1 \le m < n)$ 已证

$$u_j = \varepsilon_j v_j, \quad j = 1, \cdots, m, \tag{7.8}$$

其中 $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_j = 1$ 或-1. 下面来证: 存在 $\varepsilon_{m+1} = 1$ 或-1, 使得

$$u_{m+1} = \varepsilon_{m+1} v_{m+1}.$$

从 (7.6) 式可得

$$AU = UH, \quad AV = VG.$$

分别比较上面两个矩阵等式的第 m 列, 可得

$$Au_m = h_{1m}u_1 + \cdots + h_{mm}u_m + h_{m+1,m}u_{m+1}, \tag{7.9}$$

$$Av_m = g_{1m}v_1 + \cdots + g_{mm}v_m + g_{m+1,m}v_{m+1}. \tag{7.10}$$

分别在 (7.9) 式和 (7.10) 式两边左乘 u_i^T 和 v_i^T, 可得

$$h_{im} = u_i^T A u_m, \quad g_{im} = v_i^T A v_m, \quad i = 1, \cdots, m,$$

再利用 (7.8) 式就有

$$h_{im} = \varepsilon_i \varepsilon_m g_{im}, \quad i = 1, \cdots, m. \tag{7.11}$$

将 (7.11) 式代入 (7.9) 式, 并利用 (7.8) 式和 (7.10) 式, 可得

$$\begin{aligned} h_{m+1,m}u_{m+1} &= \varepsilon_m(Av_m - \varepsilon_1^2 g_{1m}v_1 - \cdots - \varepsilon^2 g_{mm}v_m) \\ &= \varepsilon_m(Av_m - g_{1m}v_1 - \cdots - g_{mm}v_m) \\ &= \varepsilon_m g_{m+1,m}v_{m+1}. \end{aligned} \tag{7.12}$$

由此即知

$$|h_{m+1,m}| = |g_{m+1,m}|.$$

而 $h_{m+1,m} \neq 0$, 故 (7.12) 式蕴含着

$$u_{m+1} = \varepsilon_{m+1}v_{m+1},$$

其中$\varepsilon_{m+1} = 1$ 或 -1.
因此, 由归纳法原理即知定理得证. □

一个上 Hessenberg 矩阵 $H = [h_{ij}]$, 如果其次对角元均不为零, 即$h_{i+1,i} \neq 0$ $(i = 1, \cdots, n-1)$, 则称它是**不可约**的. 上述定理表明: 如果 $Q^TAQ = H$ 为不可约的上 Hessenberg 矩阵, 其中 Q 为正交矩阵, 则Q 和 H 完全由 Q 的第一列确定(这里是在相差一个正负号的意义下的唯一).

考虑对上 Hessenberg矩阵 H 进行一次 QR 迭代的具体实现问题. 第一步是计算 H 的 QR 分解. 由于 H 的特殊性, 这一步可用 $n-1$ 个平面旋转变换来完成. 设$n=5$, 并假定已经确定了两个平面旋转变换 P_{12} 和 P_{23}, 使得 $P_{23}P_{12}H$ 有如下形状:

$$P_{23}P_{12}H = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & h_{33} & \times & \times \\ & & h_{43} & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}.$$

然后再 $(3,4)$ 坐标平面内选择平面旋转变换 P_{34}, 使得

$$P_{34}P_{23}P_{12}H$$

的 $(4,3)$ 位置上的元素为零, 即确定$P_{34}=G(3,4,\theta_3)$, 使得旋转角 θ_3 满足

$$\begin{bmatrix} \cos\theta_3 & \sin\theta_3 \\ -\sin\theta_3 & \cos\theta_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{33} \\ h_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times \\ 0 \end{bmatrix}.$$

$P_{34}P_{23}P_{12}H$ 就有如下形状:

$$P_{34}P_{23}P_{12}H = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{bmatrix}.$$

对于一般的 n 阶上 Hessenberg 矩阵 H, 可以确定$n-1$ 个平面旋转变换 $P_{12}, P_{23}, \cdots, P_{n-1,n}$, 使得

$$P_{n-1,n}P_{n-2,n-1}\cdots P_{12}H = R$$

是上三角阵. 令

$$Q = (P_{n-1,n}P_{n-2,n-1}\cdots P_{1,2})^T,$$

则$H = QR$.

下面计算

$$\widetilde{H} = RQ = RP_{12}^T P_{23}^T \cdots P_{n-1,n}^T.$$

由于 P_{12} 是 $(1,2)$ 坐标平面内的旋转变换, 因此 RP_{12}^T 仅有前两列与 R 不同, 而 RP_{12}^T 的前两列由 R 的前两列的线性组合构成, R 又是上三角阵, 故 RP_{12}^T 必有如下形状($n=5$ 的情形):

$$RP_{12}^T = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ {\color{red}\times} & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \\ & & & & \times \end{bmatrix}.$$

同样, P_{23} 是 $(2,3)$ 坐标平面内的旋转变换, $RP_{12}^TP_{23}^T$ 仅有第二和第三列与 RP_{12}^T 不同, 它们是 RP_{12}^T 的第二和第三列的线性组合, 故 $RP_{12}^TP_{23}^T$ 有如下形状($n=5$ 的情形):

$$RP_{12}^TP_{23}^T = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \\ & & & & \times \end{bmatrix}.$$

如此进行下去, 最后我们得到的 $\widetilde{H}$ 仍是一个上 Hessenberg 矩阵. 而且不难算出, 这样进行的一次 QR 迭代的运算量是 $O(n^2)$. 注意, 对一般方阵进行的一次 QR 迭代的运算量是 $O(n^3)$.

目录

带原点位移的 QR 迭代

基本的 QR 算法是线性收敛的, 其收敛速度取决于特征值之间的分离程度. 为了加速其收敛速度, 类似于反幂法, 可引进原点位移. 设第 m 步迭代的位移为 μ_m, 则**带原点位移的 QR 迭代格式** 如下:

$$
\begin{aligned}
H_m - \mu_m I &= Q_m R_m, \\
H_{m+1} &= R_m Q_m + \mu_m I,
\end{aligned}
$$

这里 $H_0 = H \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是给定的上 Hessenberg 矩阵.

位移的选取: 由于 H_m 为上 Hessenberg 矩阵, 故其最后一行仅有两个非零元素 $h_{n,n-1}^{(m)}$ 和 $h_{n,n}^{(m)}$. 若 QR 算法收敛, 则当 m 充分大时, $h_{n,n-1}^{(m)}$ 就很小, 因而 $h_{nn}^{(m)}$ 就接近于 H 的一个特征值. 可选取位移为 $\mu_m = h_{nn}^{(m)}$.

对于这样选取的位移, 若 $h_{n,n-1}^{(m)} = \varepsilon$, 则

$$h_{n,n-1}^{(m+1)} = O(\varepsilon^2). \tag{8.1}$$

将 $H_m - h_{nn}^{(m)} I$ 约化成上三角阵需 $n-1$ 步. 现假定前面 $n-2$ 步已经完成, 因为前 $n-2$ 步不改变 $H_m - h_{nn}^{(m)} I$ 的最后一行, H_{m2} 变为

$$\widetilde{H}_{m2} = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \varepsilon & 0 \end{bmatrix},$$

约化的第 $n-1$ 步就是要消去 ε, 即确定 $c = \cos\theta$ 和 $\sin\theta$, 使得

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \varepsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma \\ 0 \end{bmatrix}.$$

从平面旋转变换的定义, 得

$$c = \frac{\alpha}{\sigma}, \quad s = \frac{\varepsilon}{\sigma}, \quad \sigma = \sqrt{\alpha^2 + \varepsilon^2}.$$

这样, 通过简单的计算可知

$$h_{n,n-1}^{(m+1)} = -s^2\beta = -\frac{\beta}{\sigma^2}\varepsilon^2.$$

目录

双重步位移的 QR 迭代

带原点位移的 QR 迭代存在严重的缺点: **若 A 具有复共轭特征值, 则实位移一般并不能起到加速度作用.** 为了克服这一缺点, 下面来介绍**双重步位移的 QR 迭代**, 其基本思想是将两步带原点唯一的 QR 迭代合并为一步, 以避免复数运算.

设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 考察如下的迭代格式:

$$\begin{cases} H_1 = Q_0^T A Q_0, & (\text{上 Hessenberg 分解}) \\ H_k - \mu_k I = Q_k R_k, & (\text{QR 分解}) \\ H_{k+1} = R_k Q_k + \mu_k I, & k = 1, 2, \cdots . \end{cases} \tag{9.1}$$

不失一般性, 假定迭代格式 (9.1) 中出现的上 Hessenberg 矩阵都是不可约的. 若不然, 在迭代的某一步, 已有

$$H_k = \begin{bmatrix} H_{11}^{(k)} & * \\ 0 & H_{22}^{(k)} \end{bmatrix},$$

可以分别对 $H_{11}^{(k)}$ 和 $H_{22}^{(k)}$ 进行 QR 迭代即可.

在一定条件下取位移 $\mu_k = h_{nn}^{(k)}$ 可起到加速收敛的作用. 实矩阵可以有复特征值, 假如 H_k 的尾部 2×2 子矩阵

$$G_k = \begin{bmatrix} h_{mm}^{(k)} & h_{mn}^{(k)} \\ h_{nm}^{(k)} & h_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}, \quad m = n - 1,$$

有一对复共轭特征值 μ_1 和 μ_2 时, 不能期望 $h_{nn}^{(k)}$ 最终收敛于 A 的某个特征值, 因而此种情形再取位移为 $\mu_k = h_{nn}^{(k)}$ 就完全起不到加速收敛的作用. 为了加速收敛, 应该取 μ_1 或μ_2 作位移. 但这样就涉及复数运算, 而这是不希望的. 为了避免复运算的出现, 考虑 μ_1 和 μ_2 连续作两次位移, 即进行如下的迭代:

$$\begin{aligned} H - \mu_1 I &= U_1 R_1, \qquad & H_1 &= R_1 U_1 + \mu_1 I, \\ H_1 - \mu_2 I &= U_2 R_2, \qquad & H_2 &= R_2 U_2 + \mu_2 I, \end{aligned}$$

记 $H = H_k$. 对上面迭代所产生的矩阵进行一些简单的推算, 可得

$$M = QR, \tag{9.2}$$

$$H_2 = Q^* HQ, \tag{9.3}$$

其中

$$M = (H - \mu_1 I)(H - \mu_2 I), \tag{9.4}$$

$$Q = U_1 U_2, \quad R = R_2 R_1. \tag{9.5}$$

由 (9.4) 式可得

$$M = H^2 - sH + tI, \tag{9.6}$$

其中

$$s = \mu_1 + \mu_2 = h_{mm}^{(k)} + h_{nn}^{(k)} \in \mathbb{R},$$
$$t = \mu_1 \mu_2 = \det G_k \in \mathbb{R}.$$

因此 M 是一个实矩阵. **如果 μ_1 和 μ_2 均不是 H 的特征值, 并假定在迭代过程中选取 R_1 和 R_2 的对角元均为正数, 则由 (9.2) 式可推知, Q 亦是实的. 故由 (9.3) 式知 H_2 也是实的.**

在没有误差的情况下，用 μ_1 或 μ_2 连续作两次位移进行 QR 迭代产生的 H_2 仍是实的上 Hessenberg 矩阵.

实际计算时，由于舍入误差的影响，如此得到的 H_2 一般并不一定是实的.

为了确保计算得到的 H_2 仍是实的，根据 (9.2) 式和 (9.3) 式，**自然按如下的步骤来计算 H_2:**
(1) 计算 $M = H^2 - sH + tI$;
(2) 计算 M 的 QR 分解: $M = QR$;
(3) 计算 $H_2 = Q^T HQ$.

然而，如此计算的第一步形成 M 的运算量就是 $O(n^3)$. 当然，这是不希望的.

前面的定理的结论: 不论采用什么样的方法去求正交矩阵 $\widetilde{Q}$, 使得 $\widetilde{Q}^T H \widetilde{Q} = \widetilde{H}_2$ 是上 Hessenberg 矩阵, 只要保证 $\widetilde{Q}$ 的第一列与Q 的第一列一样, 则 $\widetilde{H}_2$ 就与 H_2 本质上是一样的(所有元素的绝对值都相等).

这需要 H_2 是不可约的来加以保证. 因此, 只要 H_2 是不可约的, 就可有很大的自由度去寻求更有效的方法来实现由 H 到 H_2 的变换. 下面的定理给出 H_2 不可约的条件.

下面的定理给出 H_2 不可约的条件.

Theorem 9.1

若 H 是不可约的上 *Hessenberg* 矩阵, 且 μ_1 和 μ_2 均非 H 的特征值, 则 H_2 也是不可约的上 *Hessenberg* 矩阵.

证明 用反证法. 记 $H_2 = [\widetilde{h}_{ij}]$, 并假定存在$r(1 \le r \le n-1)$, 使得 $\widetilde{h}_{r+1,r} = 0$, 而$\widetilde{h}_{i+1,i} \neq 0$ $(i = 1, \cdots, r-1)$.

比较等式 $HQ = QH_2$ 两边矩阵的前 r 列, 得

$$\begin{aligned} Hq_j &= \widetilde{h}_{1j}q_1 + \cdots + \widetilde{h}_{jj}q_j + \widetilde{h}_{j+1,j}q_{j+1}, \quad j = 1, \cdots, r-1, \\ Hq_r &= \widetilde{h}_{1r}q_1 + \widetilde{h}_{2,r}q_2 + \cdots + \widetilde{h}_{rr}q_r. \end{aligned}$$

由此可得

$$(\alpha_0 I + \alpha_1 H + \cdots + \alpha_r H^r)q_1 = 0, \tag{9.7}$$

其中

$$\alpha_r = (\widetilde{h}_{21}\widetilde{h}_{32}\cdots\widetilde{h}_{r,r-1})^{-1} \neq 0.$$

由 $M = QR$, 得

$$q_1 = r_{11}^{-1} M e_1.$$

将其代入 (9.7) 式, 并注意到 M 也是 H 的多项式, 就有

$$My = 0, \tag{9.8}$$

其中

$$y = (\alpha_0 I + \alpha_1 H + \cdots + \alpha_r H^r) e_1.$$

记 $H = [h_{ij}]$, 并注意到 H 是不可约的上 Hessenberg 矩阵, 直接计算可知 y 的第 $r+1$ 个分量为(逐个乘$HH \cdots He_1$)

$$\alpha_r h_{21} h_{32} \cdots h_{r+1,r} \neq 0,$$

也就是说方程组 (9.8) 有非零解, 而这与 μ_1 和 μ_2 均非 H 的特征值蕴含着 M 非奇异矛盾.

这样, 可以从另外的途径来实现H 到 H_2 的变换. 首先,
从 (9.2) 式知, Q 的第一列与M 的第一列共线(**其实 Q 的第一列就相当于由 M 的第一列单位化而得到的**). 由 (9.6) 式容易算出

$$Me_1 = (\xi_1, \xi_2, \xi_3, 0 \cdots, 0)^T,$$

其中

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= (h_{11}^{(k)})^2 + h_{12}^{(k)} h_{21}^{(k)} - s h_{11}^{(k)} + t, \\
\xi_2 &= (h_{21}^{(k)})(h_{11}^{(k)} + h_{22}^{(k)} - s), \\
\xi_3 &= h_{21}^{(k)} h_{32}^{(k)}.
\end{aligned}$$

其次, 如果 Householder 变换 P_0 将 Me_1 变为$\alpha e_1(\alpha \in \mathbb{R}, Me_1 = \alpha P_0 e_1)$, 则 P_0 的第一列与 Me_1 共线, **从而 P_0 的第一列就可作为 Q 的第一列, 即 $P_0 e_1 = Q e_1$.**

由关于 Householder 变换的理论知, P_0 可以按如下方式确定:

$$P_0 = \mathrm{diag}(\widetilde{P}_0, I_{n-3}),$$

其中

$$\widetilde{P}_0 = I_3 - \beta v v^T, \quad v = \begin{bmatrix} \xi_1 - \alpha \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{bmatrix},$$

$$\alpha = (\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2)^{1/2}, \quad \beta = 2/(v^T v).$$

现令

$$B = P_0 H P_0,$$

则只要能找到第一列为e_1 的正交矩阵$\widetilde{Q}$, 使得$\widetilde{Q}^T B \widetilde{Q} = \widetilde{H}_2$ 为上 Hessenberg 矩阵, 那么$\widetilde{H}_2$ 就是希望得到的H_2.

由前面约化一个矩阵为上Hessenberg 矩阵的方法可知, 这是容易办到的.

只需确定$n-2$ 个Householder 变换$P_1, P_2, \cdots, P_{n-2}$, 使得

$$P_{n-2}\cdots P_1 B P_1 \cdots P_{n-2} = \widetilde{H}$$

为上Hessenberg 矩阵, 则$\widetilde{Q} = P_1 \cdots P_{n-2}$ 的第一列就为e_1.

由于B 所具有的特殊性, 实现这一约化过程所需的运算量仅为$O(n^2)$.

事实上, 由于用P_0 将H 相似变换为B 只改变了H 的前三行和前三列, 故B 有如下形状:

$$B = P_0 H P_0 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \cdots & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \cdots & \times & \times \\ + & \times & \times & \times & \cdots & \times & \times \\ + & + & \times & \times & \cdots & \times & \times \\ & & & \times & \cdots & \times & \times \\ & & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & & \times & \times \end{bmatrix}.$$

仅比上Hessenberg 矩阵多三个可能的非零元素"+".

由B 的这种特殊性易知, 用来约化B 为上Hessenberg 矩阵的第一个Householder 变换P_1 具有如下形状:

$$P_1 = \mathrm{diag}(1, \widetilde{P}_1, I_{n-4}),$$

其中$\widetilde{P}_1$ 为3 阶Householder 变换, 而且P_1BP_1 具有如下形状:

$$P_1BP_1 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \cdots & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \cdots & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \cdots & \times & \times \\ & + & \times & \times & \times & \cdots & \times & \times \\ & + & + & \times & \times & \cdots & \times & \times \\ & & & & \times & \cdots & \times & \times \\ & & & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & & & \times & \times \end{bmatrix}.$$

一般地, 第k 次约化所用的Householder 变换P_k 具有如下形状:

$$P_k = \mathrm{diag}(I_k, \widetilde{P}_k, I_{n-k-3}), \quad k = 1, \cdots, n-3,$$

其中$\widetilde{P}_k$ 为3 阶Householder 变换, 而且$P_{n-3} \cdots P_1 B P_1 \cdots P_{n-3}$ 具有如下形状:

$$P_{n-3} \cdots P_1 B P_1 \cdots P_{n-3} = \begin{bmatrix} \times & \cdots & \times & \times & \times \\ \times & \cdots & \times & \times & \times \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & \times & \times & \times \\ & & + & \times & \times \end{bmatrix}.$$

因此, 最后一次约化所用的Householder 变换P_{n-2} 具有如下形状:

$$P_{n-2} = \mathrm{diag}(I_{n-2}, \widetilde{P}_{n-2}),$$

其中$\widetilde{P}_{n-2}$ 为2 阶Householder 变换.

Algorithm 2 (Francis双重步位移的QR 迭代)

$m = n - 1$
$s = H(m,m) + H(n,n)$
$t = H(m,m)H(n,n) - H(m,n)H(n,m)$
$x = H(1,1)H(1,1) + H(1,2)H(2,1) - sH(1,1) + t$
$y = H(2,1)(H(1,1) + H(2,2) - s)$
$z = H(2,1)H(3,2)$
for $k = 0 : n-3$
    $[v, \beta] =$ **house**$([x, y, z]^T)$
    $q = \max\{1, k\}$
    $H(k+1 : k+3, q : n) = (I - \beta vv^T)H(k+1 : k+3, q : n)$
    $r = \min\{k+4, n\}$
    $H(1 : r, k+1 : k+3) = H(1 : r, k+1 : k+3)(I - \beta vv^T)$
    $x = H(k+2, k+1)$
    $y = H(k+3, k+1)$
    if $k < n-3$
        $z = H(k+4, k+1)$
    end
end

目录

隐式QR算法

QR方法作为一种有效的算法，还需要给出一种有效的判定准则，来判定迭代过程所产生的的上Hessenberg矩阵的次对角元何时可以忽略不计.一种简单而实用的准则是，当

$$|h_{i+1,i}| \leqslant (|h_{i,i}| + |h_{i+1,i+1}|)\mathbf{u}$$

时，就将$h_{i+1,i}$看成零.这样做的理由是，在前面约化A为上Hessenberg矩阵时就已经引进了量级为$\|A\|_F\mathbf{u}$的误差.

隐式QR算法

（1）输入A.
（2）上Hessenberg化：计算A的上Hessenberg分解，
得$H=U_0^TAU_0; Q=U_0$.
（3）收敛性判定：
（i）把所有满足条件

$$|h_{i,i-1}|\leqslant(|h_{i,i}|+|h_{i-1,i-1}|)\mathbf{u}$$

的$h_{i,i-1}$置零.
（ii）确定最大的非负整数m和最小的非负整数l，使得

$$H=\begin{array}{cc}\begin{bmatrix}H_{11} & H_{12} & H_{13}\\ 0 & H_{22} & H_{23}\\ 0 & 0 & H_{33}\end{bmatrix} & \begin{array}{c} l\\ n-l-m\\ m\end{array}\\ \begin{array}{ccc} l & n-l-m & m\end{array} & \end{array}$$

其中H_{33}为拟上三角阵，而H_{22}是不可约的上Hessenberg矩阵.

（iii）如果$m=n$，则输出有关信息，结束；否则进行下一步.
（4）QR迭代：对H_{22}做一次双重步位移的QR迭代得

$$H_{22}=P^TH_{22}P, \quad P=P_0P_1\cdots P_{n-m-l-2}.$$

（5）计算

$$Q=Qdiag(I_l,P,I_m), \quad H_{12}=H_{12}P, \quad H_{23}=P^TH_{23},$$

然后转步（3）.

实际计算的统计表明，这一算法每分离出一个1×1或2×2子矩阵平均需2次QR迭代.因此，如果只计算特征值，则运算量平均约为$10n^3$；如果Q和T都需要，则运算量平均为$25n^3$.
误差分析的结果标明，上述算法所得到的实Schur标准形$\hat{T}$正交相似于一个非常靠近A的矩阵，即

$$Q^T(A+E)Q = \hat{T}, \quad Q^TQ = I, \quad \|E\|_2 \approx \|A\|_2\mathbf{u};$$

计算所得的变换矩阵$\hat{Q}$几乎是正交的，即

$$\hat{Q}^T\hat{Q} = I + F, \quad \|F\|_2 \approx \mathbf{u},$$

这里$\mathbf{u}$表示机器精度.

Gram–Schmidt

(1) Compute $r_{11} := \|x_1\|_2$. If $r_{11} = 0$, Stop, else, $q_1 = x_1/r_{11}$.
(2) For $j = 2, \cdots, r$, Do
(3) Compute $r_{ij} := (x_j, q_i)$, for $i = 1, 2, \cdots, j-1$.
(4) $\hat{q} = x_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} q_i$.
(5) $r_{jj} = \|\hat{q}\|_2$.
(6) If $r_{jj} = 0$ stop, else $\hat{q}_j = x_j / r_{jj}$.
(7) End Do

$$X = [x_1, \cdots, x_r], Q = [q_1, \cdots, q_r], X = QR.$$

Modified Gram–Schmidt

(1) Compute $r_{11} := \|x_1\|_2$. If $r_{11} = 0$, Stop, else, $q_1 = x_1/r_{11}$.
(2) For $j = 2, \cdots, r$, Do:
(3) Define $\hat{q} := x_j$.
(4) For $i = 1, \cdots, j-1$, Do:
(5) $r_{ij} := (\hat{q}, q_i)$
(6) $\hat{q} := \hat{q} - r_{ij} q_i$
(7） End Do
(8) Compute $r_{jj} = \|\hat{q}\|_2$
(9) If $r_{jj} = 0$ stop, else $q_j = \hat{q}/r_{jj}$
(10) End Do

Householder Orthogonalization Process

Let

$$R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & \cdots & R_{1r} \\ & R_{22} & \cdots & R_{2r} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & R_{rr} \end{pmatrix}$$

$$H_r \cdots H_1 X = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$X = H_1 \cdots H_r \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} = H_1 \cdots H_r E_r R$$

where E_r is the first r columns of the identity matrix. Let $Q = H_1 \cdots H_r E_r$, we have

$$X = QR.$$

Kantorovich Inequality

Theorem: Let A is a symmetric positive definite matrix with the largest and smallest eigenvalues λ_N and λ_1, respectively. Then

$$\frac{\|x\|_A^2\|x\|_{A^{-1}}^2}{\|x\|_2^4} \le \frac{(\lambda_N+\lambda_1)^2}{4\lambda_N\lambda_1} \text{ for any } x \neq 0.$$

Proof: Let $Q \in \mathbb{R}^{N\times N}$ be a unitary matrix such that

$$A = Q^T DQ \quad \text{with} \quad D \text{ a digonal matrix.}$$

We only need to prove the result when $\|x\|_2 = 1$. Let $y = Qx = [y_1, \cdots, y_N]^T$. Then

$$\|x\|_A^2\|x\|_{A^{-1}}^2 = (Dy, y)(D^{-1}y, y) = \lambda\psi(y).$$

with $\lambda = \sum_{i=1}^N y_i^2\lambda_i$, $\psi(y) = \sum_{i=1}^N y_i^2\frac{1}{\lambda_i}$.

Note that $\sum_{i=1}^{N} y_i^2 = 1$. In addition, $1/x$ is a convex function. Hence $\psi(y)$ (a convex combination of $1/\lambda_1, 1/\lambda_2, \cdots, 1/\lambda_N$) is bounded from above by the line curve that joins $(\lambda_1, 1/\lambda_1)$ and $(\lambda_N, 1/\lambda_N)$, namely

$$\psi(y) \leq \frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_N} - \frac{\lambda}{\lambda_1 \lambda_N}.$$

This leads to

$$\|x\|_A^2 \|x\|_{A^{-1}}^2 \leq \lambda \left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_N} - \frac{\lambda}{\lambda_1 \lambda_N} \right).$$

The maximum of the right–hand side is reached when $\lambda = \frac{\lambda_1 + \lambda_N}{2}$ which proves the desired the result.

Steepest Descent Methods

$$
\begin{aligned}
\|e_{k+1}\|_A^2 &= (Ae_{k+1}, e_{k+1}) = (r_{k+1}, e_{k+1}) = (r_{k+1}, e_k - \alpha_k r_k) \\
&= (r_{k+1}, e_k) = (r_k - \alpha_k A r_k, e_k) \\
&= (r_k, A^{-1} r_k) - \alpha_k (r_k, r_k) \\
&= \|e_k\|_A^2 (1 - \frac{\|r_k\|_2^4}{\|r_k\|_A^2 \|r_k\|_{A^{-1}}^2}) \\
&\leq \left(\frac{\lambda_N - \lambda_1}{\lambda_N + \lambda_1} \right)^2 \|e_k\|_A^2 .
\end{aligned}
$$

Where we use

$$
(r_k, A^{-1} r_k) = \|e_k\|_A^2 \text{ and } \alpha_k = \frac{(r_k, r_k)}{\|r_k\|_A^2}.
$$

Biconjugate Gradient Method

(1) Compute $r_0 = b - Ax_0$. Choose r_0^* such that $(r_0, r_0^*) \neq 0$.
(2) Set $p_0 = r_0$, $p_0^* = r_0^*$
(3) For $j = 0, 1, \cdots$, until convergence Do:
(4) $\quad \alpha_j := (r_j, r_j^*)/(Ap_j, p_j^*)$
(5) $\quad x_{j+1} := x_j + \alpha_j p_j$
(6) $\quad r_{j+1} := r_j - \alpha_j A p_j$
(7) $\quad r_{j+1}^* = r_j^* - \alpha_j A^T p_j^*$
(8) $\quad \beta_j = (r_{j+1}, r_{j+1}^*)/(r_j, r_j^*)$
(9) $\quad p_{j+1} = r_{j+1} + \beta_j p_j$
(10) $\quad p_{j+1}^* = r_{j+1}^* + \beta_j p_j^*$
(11) End Do

$$(r_j, r_i^*) = 0 \text{ and } (Ap_j, p_i^*) = 0, j \neq i.$$