Lect 11 Eigenvalue Problem

一、Why?

1. 量子力学: $\hat{H}\psi = \lambda\psi$

目的: 求最小特征值 λ_{min}: 基态

2. 动力系统: $\dot{\vec{y}} = F(\vec{y})$

局部稳定性, $J = \partial F / \partial \vec{y}$ 特征值及向量.

3. Markov链: $\mu_{n+1} = P \cdot \mu_n$

不变分布的收敛速度; P的第二大特征值.

……

二、基本结果:

1. Jordan形: $A = P \cdot J \cdot P^{-1}$, $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$

2. 对称矩阵. $A = Q \Lambda Q^T$, $Q^T Q = I$,

$\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$

3. Courant-Fisher定理:

设A对称, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$, 定义Rayleigh商.

$$R_A(u) = \frac{u^T A u}{u^T u}$$

则

$$\lambda_1 = \max R_A(u), \quad \lambda_n = \min R_A(u)$$

4. Gershgörin 圆盘定理：$A \in C^{n\times n}$，则A特征值位于区域

$$D = \bigcup_i D_i \text{ 内}$$

其中

$$D_i = \{ z \mid |z - a_{ii}| \le \sum_{j \ne i} |a_{ij}| \}$$

证：设 $A \cdot X = \lambda X$，及 $|x_j| = \|X\|_\infty$，则

$$|\lambda - a_{jj}| = \left| \sum_{k \ne j} a_{jk} \, x_k / x_j \right| \le \sum_{k \ne j} |a_{jk}| \cdot |x_k| / \|X\|_\infty$$

$$\le \sum_{k \ne j} |a_{jk}| \quad \#.$$

二. 幂法 (power method)

幂法是计算矩阵模最大特征值及其特征向量的方法。

1. 设 $A = V \Lambda \cdot V^{-1}$，$\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$，及

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge \cdots \ge |\lambda_n|$$

任取 $u_0 = \alpha_1 v_1 + \cdots + \alpha_n v_n$，$v_i$ 为 V 的第 i 列。

则 $A^k u_0 = \sum_j \alpha_j A^k v_j = \sum_j \alpha_j \lambda_j^k v_j$

$$= \lambda_1^k \left(\alpha_1 v_1 + \sum_{j \neq 1} \alpha_j \left(\lambda_j / \lambda_1 \right)^k v_j \right)$$

由此知 $$\lim_{k \to \infty} \frac{A^k u_0}{\lambda_1^k} = \alpha_1 v_1$$

2. 算法：

step1：设置初值 u_0, $k=1$;

step2：求 $y_k = A \cdot u_{k-1}$;

step3：找 k s.t. μ_k 为 y_k 中模最大的分量.

step4：归一化：$u_k = y_k / \mu_k$，k 增加 1.

则 $u_k \to v_1$, $\mu_k \to \lambda_1$.

3. 收敛性：

定理：设 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 有 p 个不同特征值，$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_p|$ 且 λ_1 为半单的（即 λ_1 的几何重数 = 代数重数）。如 u_0 在 λ_1 的特征子空间投影不为 0，则 $u_k \to \lambda_1$ 的某特征向量 v_1，$\mu_k \to \lambda_1$.

pf：由假设

11-04

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

$J_i \in \mathbb{C}^{n_i \times n_i}$ 为 λ_i 的 Jordan 块上三角阵，$\sum_{i=1}^{p} n_i = n$

λ_1 为非亏 $\Leftrightarrow J_1 = \lambda_1 I_{n_1}$.

令 $y = V^{-1} u_0$，及 $y = (y_1^T, \cdots, y_p^T)^T$，

$V = [V_1, V_2, \cdots, V_p]$ $\quad V_i$ 为 $n \times n_i$ 的矩阵

则
$$A^k u_0 = \sum_{j=1}^{p} V_j J_j^k y_j$$
$$= \lambda_1^k V_1 y_1 + \sum_{j=2}^{p} V_j J_j^k y_j$$
$$= \lambda_1^k \left(V_1 y_1 + \sum_{j=2}^{p} V_j J_j^k / \lambda_1^k \, y_j\right)$$

于是 $\lim\limits_{k \to \infty} \frac{1}{\lambda_1^k} A^k u_0 = V_1 y_1 \neq 0$

令 $v_1 = \zeta^{-1} V_1 y_1$，ζ 为 $V_1 y_1$ 的模最大分量，

而 ζ_k 为 $A^k u_0$ 的模最大分量，则

$$u_k = A u_{k-1} / \mu_k = A^k u_0 / \zeta_k = \frac{A^k u_0}{\lambda_1^k} \Big/ \frac{\zeta_k}{\lambda_1^k}$$
$$\longrightarrow V_1 y_1 / \zeta = v_1$$

而 $Au_{k-1} = \mu_k u_k$ $\quad u_k \to v_1 \Rightarrow \mu_k \to \lambda_1$.

4. 其它特征值的计算:

设 $Av_1 = \lambda_1 v_1$, 设西阵 P s.t. $Pv_1 = \alpha e_1$

则 $\quad PAP^* e_1 = \lambda_1 e_1$

即 $\quad PAP^* = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots \\ 0 & B_1 \end{bmatrix}$ 对 B_1 可继续用幂法.

5. 反幂法 (inverse power method)

反幂法即对 A^{-1} 用幂法得 A 模最小的特征值.

$$\begin{cases} Ay_k = u_{k-1} \\ \mu_k = \xi_i \text{ 为 } y_k \text{ 模最大的分量} \\ u_k = y_k / \mu_k \end{cases}$$

实际应用中, 反幂法主要用来求接近 $\tilde{\lambda}$ 的特征值 λ^* (即 $\tilde{\lambda} \approx \lambda^*$ 为一近似), 应用幂法至 $A - \tilde{\lambda} I$, 即

$$(A - \tilde{\lambda} I) y_k = u_{k-1}$$

即得一收敛较快的方法.

6. Rayleigh商加速：

如A对称，已有近似特征向量 u_0，则可用以下Rayleigh商加速：

<u>step1</u>：初值 u_0，$k=1$；

<u>step2</u>：$\mu_k = R_A(u_{k-1})$

<u>step3</u>：解 $(A-\mu_k I)y_k = u_{k-1}$；

<u>step4</u>：$u_k = y_k / \|y_k\|_2$，迭代

Rayleigh商加速如收敛，则为三次收敛！

四. QR方法简述：

给定 $A_0 = A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，QR算法的格式为

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

$$A_m = R_m Q_m, \quad m=1,2,\cdots$$

其中Q为酉阵 $(Q^*Q=I)$，R上三角阵.

显然：$A_m = Q_m^* A_{m-1} Q_m$

$$= \tilde{Q}_m^* A \tilde{Q}_m, \quad \tilde{Q}_m = Q_1 \cdots Q_m$$

定理：设A的特征值 $|\lambda_1|>|\lambda_2|>\cdots>|\lambda_n|>0$，设V的第i行为A对应于 λ_i 的左特征向量 $(A=V^{-1}\cdot\Lambda\cdot V)$，如V有LU分解，则QR迭代中 $A_m=[\alpha_{ij}^{(m)}]$ 的对角线以下元素 $\longrightarrow 0$，且对角线 $\alpha_{ii}^{(m)}\longrightarrow\lambda_i$，$i=1,\cdots,n$

RMK：QR方法二次收敛！