Methods for Calculating Eigenvalues with High Accuracy

Zhaohui Zhang Feng Duan Jianhai Wu Mingyang Li

Shanghai Zhongli Investment Development Co., Ltd., Shanghai, 201506, China

Abstract

In the work, we often encounter a variety of eigenvalue solving problems. For the small-scale matrix, the *Lanczos* method is too cumbersome, and the matrix encountered in daily life is not symmetric Matrices or narrow-band sparse matrix. The paper discusses the *G-SQR* triangulation method, and proposes iterative stability and error checking methods, and gives specific computational procedures.

Keywords

eigenvalue; QR; high precision

高精度计算特征值的方法

张朝辉 段峰 邬建海 李名阳

上海众力投资发展有限公司，中国·上海 201506

摘 要

在工作中经常会遇到各种特征值求解问题，对于规模较小的矩阵采用 *Lanczos* 方法求解显得过于臃肿，且日常所遇到的矩阵并非对称矩阵或窄带稀疏矩阵。论文主要讨论了 *G-SQR* 三角化方法，同时提出了迭代稳定性以及误差检验方法，并给出具体的计算过程。

关键词

特征值；QR；高精度

1 简介

一个 N 阶矩阵有 N 个特征向量以及与之相应的特征值，当且仅当有公式 (1.1) 成立：

$$A\times x=\lambda x \tag{1.1}$$

由于特征向量的任何非零倍数仍然是特征向量，在实际计算中可以把这些特征向量认为是相同的，即所计算的特征向量是特征值对应的特征子空间的一组基，此时有公式（1.2）成立：

$$\det|A-\lambda x|=0 \tag{1.2}$$

展开公式（1.2）得到一个以 λ 为根的多项式，这表明 N 阶矩阵有 N 个特征值（可能存在重根的情形），故可以通过求多项式的根的方法来求特征值。以上两个方程说明了每一个特征值都有与之对应的特征向量，并提供了求特征向量的方法 [1]。

此外，还注意到对特征向量增加一定的倍数特征值没有改变，这一重要性质为提高计算精度和效率提供了思路。

2 特征值求解的方法

数值计算中，所有计算特征值的方法最终归结于某种迭代。根据公式（1.1）可知，求解特征值最简单的方法是牛顿切线法求根，但是此方法随着条件数和矩阵规模的增大精度与效率快速降低。详细可参考 Wikinson 多项式。

变换法是一系列对矩阵条件数敏感较低的方法，同时对矩阵带宽与稀疏性敏感度较低。这类方法较适合于工程中一些中小规模的矩阵。对于一般特征值求解问题：

$$Kx=\lambda Mx \tag{2.1}$$

利用特征向量的正交性可以得到下面的性质：

$$\begin{aligned}\Phi^T K\Phi &= diag\{\lambda_i\}\\ \Phi^T M\Phi &= I\end{aligned} \tag{2.2}$$

由于变换法的目标是找到合适的矩阵满足以上性质，所以可以将原矩阵分别左乘和右乘适当的正交矩阵 P_k，并定义 $K_1=K$，$M_1=M$，利用下面的迭代过程求得满足要求的 P。

$$K_2 = P_1^T K_1 P$$
$$K_3 = P_2^T K_2 P_2 \tag{2.3}$$
$$...$$
$$K_n = P_{n-1}^T K_{n-1} P_{n-1}$$

在每一次迭代过程中可以选择适当的满足下面的要求：

$$S.T.n \to \infty, K_n \to diag, M_n \to I \tag{2.4}$$

实际计算中，只要两者均收敛于对角矩阵即可，不妨假设满足该条件的最后一次迭代为 l，则有：

$$K_{l+1} = P_l^T K_l P_l = diag\{k_i\}$$
$$M_{l+1} = P_l^T M_l P_l = diag\{m_i\} \tag{2.5}$$

这里 $\frac{k_i}{m_i}$ 提供了特征值信息，而提供了特征向量相关的信息。根据此过程计算特征值有两类经典的方法：

（1）三角化方法：包含但不限于 QR 方法 .

（2）雅可比方法：包含但不限于 Given 方法。

其中雅可比方法和三角化方法中的 Household 方法已被 FEA 软件广泛应用，这里不再赘述，下面只对 G-SQR 方法进行讨论。

根据线性方程组理论可知，任何非零矩阵均可以进行 QR 分解，即：

$$K=QR \tag{2.6}$$

其中，Q 是正交矩阵，R 是上三角矩阵，对（2.6）进行变换：

$$RQ=Q^TKQ \tag{2.7}$$

求解矩阵可以通过 QR 变换进行迭代，且任一组非零向量组均有标准正交基，以保证 Q 的存在性。

3 G–S 过程

给定一组线性无关的向量组，G-S 过程找到其标准正交基，下面的过程简单描述了实现过程：

Step-1.*a* $\overline{q}_1 = a_1$

Step-1.*b* $q_1 = norm(\overline{q}_1)$

Step-2.*a* $\overline{q}_2 = a_2 - (q_1^T a_2) q_1$

Step-2.*b* $q_2 = norm(\overline{q}_2)$

Etc

其中，$r_{ij}=q_i^T a_j$，用矩阵的形式表述即 A=QR。由于 A 不一定满秩，故只需检查并跳过线性相关的列即可。同样，A 非方阵时，需根据向量组相关性定理补全矩阵 A，使其满秩，再进行上述转换可以得到：

$$[A, \overline{A}]=[Q_1, Q_2][R_1, 0]^T \tag{3.1}$$

其中，是 A 的列向量的正交向量组。

4 迭代稳定性

上面的整个数值计算过程均存在圆整误差，不妨设 l-th 次迭代满足近似条件，这时矩阵 K_i 为 $\overline{K}_l$ 且有：

$$\overline{K}_1 = \overline{Q}_{l-1}{}^T (\overline{K}_{l-1} + E) \overline{Q}_{l-1} \tag{4.1}$$

公式（4.1）中 Q 包含了圆整误差和其他误差，可以通过向后的误差分析(即 Cauthy 收敛准则)来评价稳定性。此外，（4.1）式说明，变换前后的矩阵是相似矩阵，但不是正交相似，因此需要检查 K 的对角化情况：

$$\overline{H}_l = diag\{\overline{\lambda}_i\} + \Omega(\overline{H}_l) \tag{4.2}$$

将对角化良好的特征向量存储在 Q 中。误差分析表明，对于较小的误差源 δ，矩阵 $Q=\overline{Q} + \delta\overline{Q}$ 仍保持近似正交性，能满足 (4.2)。最后，在满足要求的迭代中，将对角元素作为所求出的特征值。因此，在整个过程中正交变换是核心部分。

上面的过程适用于任何非零矩阵，但是简单的 G-SQR 算法在数据存储与运算效率方面仍待改善。当矩阵规模增大时，数据存储量将急剧增长， 迭代次数亦随之增加，这将不利于工程计算中数据的存储 [2]。

为解决此问题，使用海森堡矩阵或者三对角矩阵代替迭代过程中使用的矩阵，在论文中为便于 excel 存储与运算着重说明三对角矩阵的使用与三对角分解。

在数据存储方面，单个任意矩阵占用空间为 $n*n$ 单元格，而三对角矩阵可以不存储 0 元素，因此占用空间为 $3n$-2 单元格，可见三对角矩阵占用空间随迭代次数线性增长，从而有效避免了存储爆炸现象。此外，三对角矩阵非对角元素的减少也大大提高了计算效率与精度 [3]。

最容易想到和方便实现的三对角化方法是对矩阵的每个向量进行反射，使列 a_j 满足：

$a_{i,i+1}=a_{i+1,i} \neq 0$

$a_{i,j}=0$，$j=i+2$，⋯，n

由 $\{(a_1,0\cdots0)\}$ 与 $\{(0,a_2,\cdots a_n)\}$ 互为正交补可知，将列 a_i 关于超平面 $(0,a_2\cdots a_n)$ 镜像可以满足上述条件。已知该镜像变换的矩阵如下：

$$P = I - (2vv^T) / (v^T v) = I - \beta vv^T$$

因此，对于任意给定的对称矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 使用下面的过程对其进行三对角化：k=1:n。

计算对应于第 k 列的 v 和：

$P=\beta A(K+1:n,k+1:n)v$

$$\omega = P - \left(\frac{\beta P^T v}{2}\right) v$$

$A(k+1,k)=\mathrm{norm}(A(k+1:n,k))^2$

$A(k,k+1)=A(k+1,k)$

$A(k+1:n,k+1:n)=A(k+1:n,k+1:n)-v\omega^{\mathrm{T}}-\omega v^{\mathrm{T}}$

5 案例研究

5.1 大条件数矩阵

考虑弹簧振子系统具有下面的刚度矩阵 K，与一致的单位质量矩阵,使用Matlab2010b系统的模态(这里计算特征值)，在该版本中圆整误差为：2.2e-16，

$$K = \begin{pmatrix} 10^{40}, -2\times 10^{29}, 10^{19} \\ -2\times 10^{29}, 10^{20}, 10^{9} \\ 10^{19}, 10^{9}, 1 \end{pmatrix}$$

函数 eig( ) 计算的特征值如表 1 所示。

表 1 matlab 近似特征值

	Eig
λ_1	1.0000000000000000*e*+ 040
λ_2	−1.44000112414376e+20
λ_3	−1.265594217409065e+24

Eig( ) 把矩阵当作非正定处理，得到两个负特征值，进一步使用相对误差进行误差分析发现 $\left|\lambda_i\right| \approx \left\|K\right\|$ 时，近似特征值就会有足够的精度，否则相对误差不能保证正确的特征值。显然上述矩阵有两个特征值不能满足该条件，因而只有最大特征值是正确的 [4]。仔细分析这个矩阵可以发现：

$$K = DAD,\ D = diag\{10^{20}, 10^{10}, 1\}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1, -0.2, 0.1 \\ -0.2, 1, 0.1 \\ 0.1, 0.1, 1 \end{pmatrix}$$

可以看出 K 是正定的，不存在负特征值，并且 K 有 Cholesky 分解，因此上面的两个较小特征值是完全错误的。为纠正上述问题，在 excel 中使用 QR 分解得到近似特征值如表 2 所示。

表 2 QR 近似特征值

	Eig
λ_1	1.0000000000000000*e*+040
λ_2	9.6000000000000000e+19
λ_3	9.7500000000000000e-1

这与真实特征值（1e+040，1e+020，1）非常接近。

5.2 一般矩阵

由于 G-S 过程的一般性，我们也可以对实对称矩阵进行分解，这类矩阵一般用于工程中的动力系统计算等。某发动机动力总成具有下面的刚度矩阵，如表 3 所示，下面使用此方法计算其特征值并与 Matlab 进行比较。

表 3 刚度矩阵

714000	0	0	0	−4037.6	−44982
0	525000	0	−57718.5	0	4478.6
0	0	728000	−12611.9	−3258.5	0
0	−57718.5	−12611.9	130240.4	12063.03	798.345
−4037.6	0	−3238.5	12063.03	45982.4	−14984.3
−44982	4478.6	0	798.345	−14984.3	87838.92

此矩阵的条件数为 18.665，误差条件定义为 1e-14，以确保有足够的精度，这时 eig( ) 与 QR 计算的特征值十分接近，如表 4 所示。

表 4 近似特征值比较

	Eig_QR	Eig_matlab
λ_1	728291.6551	728291.6551
λ_2	717228.4600	717228.4601
λ_3	533297.3968	533297.3968
λ_4	123555.7800	123555.7804
λ_5	89669.8006	89669.8006
λ_6	39018.6278	39018.6278

6 结语

以上例子可以发现，对于较小规模的矩阵 G-SQR 变换求解特征值具有精度高、通用性好、方便实现、计算效率高等优点，尤其是在条件数较高时具有更高的准确性 [5]。

参考文献

[1] K.J.Bath. Finite element procedures[M]. 北京 : 高等教育出版社 , 2016.

[2] Otto Bretscher. Linear algebra with application[M].Pearson,2013.

[3] Louis Komzsik. Numberical methods[M].MSC,2016.

[4] Michael Artin. Algebra[M]. 北京 : 机械工业出版社 ,2012.

[5] 庄瓦金 . 代数广义逆引论 [M]. 北京 : 科学出版社 ,2012.