国防科技大学学报
JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY
第 19 卷第 3 期　1997 年 6 月　Vol. 19 No. 3

求解对称三对角矩阵特征值问题的一种新算法*

罗晓广　李晓梅

(国防科技大学计算机系　长沙　410073)

摘　要　关于对称三对角矩阵特征值问题, 本文提出一种新的分治算法。新算法以二分法、割线法迭代为基础。不同于 Cuppen 's 方法和 Laguerre 迭代法。理论分析和数值实验的结果表明: 新算法的收敛速度明显比文 [1] 中的 Laguerre 迭代法快。在相同的精度要求下, 当问题规模较大时, 使用新算法能减少 40% 以上的计算时间。

关键词　特征值, 割线法, 二分法, Laguerre 迭代

分类号　TP301

A New Algorithm for the Eigenvalue Problem of Symmetric Tridiagonal Matrices

Luo Xiaoguang　Li Xiaomei

(Department of Computer, NUDT, Changsha, 410073)

Abstract　This paper presents a new divide-and-conquer algorithm for the eigenvalue problem of symmetric tridiagonal matrices. The new algorithm oases on bisection and secant iteration, which is different from Cuppen's method and Laguerre iteration. The results of theoretical analysis and numerical testing show that the convergent rate of our algorithm is obviously faster than that of Laguerre iteration presented in [1]. When the problem scale is quite large, with the same requirement of accuracy, more than 40% of the computing time can be reduced by using this new algorithm.

Key words　eigenvalues, secant method, bisection algorithm, Laguerre iteration

本文考虑矩阵特征值问题

* 国防预研课题资助项目
1996 年 12 月 20 日收稿

$$\boldsymbol{A}x = \lambda x$$

其中$\boldsymbol{A}$是$n\times n$阶的对称三对角实矩阵,形式如下:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & \\ \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & b_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} & \\ & & b_{n-1} & a_n & \end{pmatrix} \tag{1}$$

不失一般性,在(1)中假定所有的$b_i \neq 0$,即认为$\boldsymbol{A}$是不可约的。

不同于 Cuppen's 方法[2],本文算法将$\boldsymbol{A}$作如下划分:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_1 & 0 \\ 0 & \boldsymbol{A}_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \cdots & 0 & b_k & \cdots \\ \cdots & b_k & 0 & \cdots \\ & & & \end{pmatrix} \tag{2}$$

其中$\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2$分别是$k\times k$和$(n-k)\times(n-k)$的对称三对角矩阵。递归地,$\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2$也可以作类似的划分。

分治算法的思想就是把原问题划分成若干个子问题,从子问题的解出发求解原问题。这是一个递归过程。具体地说,先分别求出$\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2$的特征值,然后利用所得结果求解$\boldsymbol{A}$的特征值。

1 算法的理论背景

记

$$\boldsymbol{A}_0 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_1 & \\ & \boldsymbol{A}_2 \end{pmatrix} \tag{3}$$

一个令人关心的问题是,$\boldsymbol{A}_0$和$\boldsymbol{A}$的特征值存在着何种联系。首先。由$\boldsymbol{A}_0$的构造知,$\boldsymbol{A}_0$很接近$\boldsymbol{A}$,可以猜测,它们的特征值也很接近。事实上,我们有如下定理。

定理 1 (Hoffman and Weilandt[3])设$\boldsymbol{M}$是$n\times n$对称矩阵,令$\boldsymbol{M}' = \boldsymbol{M} + \boldsymbol{E}$,其中$\boldsymbol{E}$是$\boldsymbol{M}$的对称扰动矩阵。$\boldsymbol{M}'$、$\boldsymbol{M}$和$\boldsymbol{E}$的特征值分别记为:$\{\lambda_1^0 \leq \lambda_2^0 \leq \cdots \leq \lambda_n^0\}$、$\{\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n\}$和$\{\gamma_1 \leq \gamma_2 \leq \cdots \leq \gamma_n\}$,则

$$\sum_{i=1}^{n} (\lambda_i - \lambda_i^0)^2 \leq \sum_{i=1}^{n} \gamma_i^2$$

令$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{A}, \boldsymbol{M}' = \boldsymbol{A}_0, \boldsymbol{E} = \boldsymbol{A}_0 - \boldsymbol{A}$得

$$\sum_{i=1}^{n} (\lambda_i - \lambda_i^0)^2 \leq 2b_k^2 \tag{4}$$

由(4)知,b_k越小,$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{A}_0$的特征值就越接近。

下面不加证明地引入文[1]的一个定理。

定理 2 设$\{\lambda_1^0 \leq \lambda_2^0 \leq \cdots \leq \lambda_n^0\}$,$\{\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n\}$分别是$\boldsymbol{A}_0$和$\boldsymbol{A}$的特征值,则

(1) $\lambda_1^0 \in (\lambda_1, \lambda_2)$, $\lambda_n^0 \in (\lambda_{n-1}, \lambda_n)$, $\lambda_i^0 \in (\lambda_{i-1}, \lambda_{i+1})$, $1 < i < n$,

(2) $\lambda_1 \in [\lambda_1^0 - b_k, \lambda_1^0)$, $\lambda_n \in (\lambda_n^0, \lambda_n^0 + b_k]$, $\lambda_i \in (\lambda_{i-1}^0, \lambda_{i+1}^0)$, $1 < i < n$,

由于$\boldsymbol{A}_1$、$\boldsymbol{A}_2$都是不可约的,故$\boldsymbol{A}$的特征值的重数≤ 2,从而对任意$1 < i < n$,$(\lambda_{i-1}, \lambda_{i+1})$总是非空区间。

2 算法描述

由定理 2 知, A_0 的特征值为 A 的每一个特征值提供了一个包含区间。假设 A_1, A_2 的特征值已经求出, 即$\{\lambda_1^0 \le \lambda_2^0 \le \cdots \le \lambda_n^0\}$ 已知, 记 $\lambda_0^0 = \lambda_1^0 - b_k$, $\lambda_{n+1}^0 = \lambda_n^0 + b_k$, 设 $\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_n$ 是 A 的特征值。于是: $\lambda_i \in (\lambda_{i-1}^0, \lambda_{i+1}^0)$, $i = 1, 2, \cdots, n$. 事实上, 区间$(\lambda_{i-1}^0, \lambda_{i+1}^0)$ 至多包含 A 的三个特征值: $\lambda_i, \lambda_{i-1}, \lambda_{i+1}$. 我们先采用二分法压缩区间$(\lambda_{i-1}^0, \lambda_{i+1}^0)$ 成(low_i, up_i), 使得 (low_i, up_i) 只含特征值 λ, 或者虽然包含其他特征值, 但是它的长度小于等于可容许误差 tol, 一旦 A 的特征值已被分离, 便采用割线法进行迭代。设(low_i, up_i) 只含特征值 λ_i, 迭代算法描述如下

割线法: $x_1 = low_i$, $x_2 = up_i$, 计算$f(x_1)$和$f(x_2)$.

$$(\#)\quad x = x_2 - \frac{f(x_2)(x_2 - x_1)}{f(x_2) - f(x_1)},\ \text{计算} f(x)$$

if$(f(x) \quad f(x_2) > 0)$ then$\{x_2 = x, f(x_2) = f(x)\}$

else$\{x_1 = x, f(x_1) = f(x)\}$

endif

if$(x_2 - x_1 > tol)$ goto$(\#)$

$x = (x_1 + x_2)/2.$

其中, tol 是可容许误差, $f(x) = \det(A - xI)$.

割线法的计算量主要在于计算$f(x)$, 通常它由如下的三项递归式来求。

$$\begin{aligned} &P_0(x) = 1,\ P_1(x) = a_1 - x, \\ &P_i(x) = (a_i - x) \quad P_{i-1}(x) - b_{i-1}^2 \quad P_{i-2}(x),\ i = 2, \cdots, n \\ &f(x) = P_n(x) \end{aligned} \tag{5}$$

但是实际运算中, 当问题规模 n 较大时, 上面的三项递归式的计算容易引起上溢和下溢。为了避免溢出, 可作如下变换:

令 $\xi_i = \dfrac{P_i}{P_{i-1}}$, $i = 1, \cdots, n$, 在(5)式两边同时除以 P_{i-1}得到:

$$\begin{aligned} &\xi_1 = a_1 - x \\ &\xi_i = a_i - x - \frac{b_{i-1}^2}{\xi_{i-1}} \quad i = 2, 3, \cdots, n \\ &f(x) = \prod_{i=1}^{n} \xi_i \end{aligned} \tag{6}$$

文[5]证明了割线法是超线性的迭代方法, 它的收敛阶为$\dfrac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1.618$. 但在实际计算时会发现: 割线法迭代的最初若干步收敛速度并不快, 甚至明显慢于线性收敛的二分法。图 1 是$f(x)$在某特征值 x^* 邻域的草图。

从图 1 知, 只有当 x_1 和 x_2 都属于区间 I 时(在区间 I, $f(x)$严格单调。), 割线法收敛速度才达到最优。当 x_1 属于区间II或 x_2 属于区间III时, 收敛速度达不到最优, 甚至不如二分法。据此, 我们提出改进策略: 当 A 的特征值分离后, 先用二分法进行迭代; 当$f(x)$在区间(x_1, x_2)上严格单调时, 停止使用二分法, 改用割线法继续进行迭代, 直到求出该特征

值。

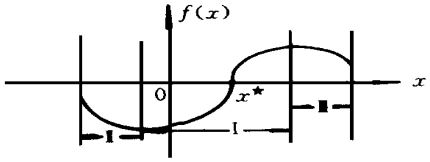

图 1

设区间$(x_1^{(1)}, x_2^{(1)})$仅含有一个特征值x^*，$y_i(i=1,2,\cdots)$是使用二分法时的第i次迭代的等分点，$x_1^{(j)}(j=2,3,\cdots)$和$x_2^{(k)}(k=2,3,\cdots)$是由等分点y_i得到的新的区间端点。$f(x)$在区间$(x_1^{(j+1)}, x_2^{(k+1)})$上严格单调的充分条件是：$f(x_1^{(j)}) > f(x_1^{(j+1)})$且$f(x_2^{(k)}) > f(x_2^{(k+1)})$. 这是因为$f(x)$是具有$n$个不同实根的$n$次多项式，因而$f(x)$有$n-1$个极值点，而且极小值点和极大值点交替出现。相邻极值点之间恰有$f(x)$的一个根。

假设$\boldsymbol{A}_1$、$\boldsymbol{A}_2$的特征值已知，下面列出算法的主要步骤。

Step1　合并$\boldsymbol{A}_1$、$\boldsymbol{A}_2$的特征值，得：$\{\lambda_1^0 \le \lambda_2^0 \le \cdots \le \lambda_n^0\}$，即为$\boldsymbol{A}_0$的特征值。

Step2　记$\lambda_0^0 = \lambda_1^0 - b_k$，$\lambda_{n+1}^0 = \lambda_n^0 + b_k$

for　$i=1,n$　do

(1) $low_i = \lambda_{i-1}$，$up_i = \lambda_{i+1}$；

(2) 利用二分法压缩区间(low_i, up_i)成(x_1, x_2)，使得(x_1, x_2)仅含$\boldsymbol{A}$的一个特征值，即λ_i.

(3) 在区间(x_1, x_2)上采用割线法求$f(x)$的第i个根λ_i.

endfor

注 1：在每次迭代之前，我们都判断区间长度是否小于可容许误差。若是，则停止迭代，取$\lambda_i = (x_1 + x_2)/2$.

注 2：$\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2$的特征值可以递归地求解，直到矩阵是$2\times2$阶或$1\times1$阶。

3　算法性能分析和数值实验

关于对称三对角特征值矩阵问题，文[1]也提出了一种分治算法，称为 Laguerre 迭代法。现在，我们把本文算法与 Laguerre 迭代法作比较。文[1]的 Laguerre 迭代定义如下：

$$L_{\pm}(x) = x + \frac{n}{-\dfrac{f'(x)}{f(x)} \pm \sqrt{(n-1)\left[(n-1)\left(-\dfrac{f'(x)}{f(x)}\right)^2 - n\left(\dfrac{f''(x)}{f(x)}\right)\right]}}$$

其中$f'(x)$、$f''(x)$分别是$f(x)$的一、二阶导数。当$x \in (\lambda_m, \lambda_{m+1})$时，$L_+(x)$比较接近$\lambda_{m+1}$，而$L_-(x)$比较接近$\lambda_{m-1}$.

采用 Laguerre 迭代产生的序列$\{x_m\}$是三阶收敛的，但每次迭代都要计算$f(x_m)$、$f'(x_m)$和$f''(x_m)$. 设$\{y_k\}$是采用割线法迭代产生的序列，它是$\frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1.618$阶收敛的，但每次迭代仅需计算函数值$f(y_k)$. 所以，若取$x_0 = y_0$，要达到同样的精确度$\epsilon$，则 Laguerre 法迭代次数少，但每次迭代运算量较大；而割线法迭代次数较多，但每次运算量较小。那么总的运算量（计算时间）如何呢？

首先注意到，$f'(x)$、$f''(x)$的计算也是通过三项递归式，即在(5)式两边求导数。因而可以认为计算$f(x)$、$f'(x)$与$f''(x)$需要相同的时间。设x_0接近$\boldsymbol{A}$的特征值x^*，对 La-

guerre 方法, 记 $e_k = x_k - x^*$, 于是存在常数 $c > 0$, 使得: $c\ e_n \approx \cdots \approx (c\ e_0)^{3^n}$, 故

$$e_n \approx (c\ e_0)^{3^n}/c$$

对于割线法, 设 y_0, y_1 接近 x^*, 记 $d_k = y_k - x^*$, 类似地则有

$$d_n \approx (c_1\ d_0)^{1.618^n}/c_1,\ c_1 > 0 \text{ 是常数。}$$

现设 $x_0 = y_0$, 即得 $e_0 = d_0$. 如果对于 Laguerre 方法要求 $e_k \leq \epsilon$, 则迭代次数

$$k \geq \frac{N}{\log 3}, \text{ 其中 } N = \log\left(\frac{\log c\epsilon}{\log\ e_0\ c}\right)$$

设每次计算 $f(x)$、$f'(x)$ 与 $f''(x)$ 的时间分别是 m, m_1, m_2. 由前面的讨论知 $m = m_1 = m_2$. 采用 Laguerre 方法达到精确度 ϵ 需要总的计算时间为:

$$T_L = \frac{3mN}{\log 3}$$

对于割线法, 若同样要求 $d_k \leq \epsilon$, 则可类似地估出迭代次数

$$k \geq \frac{M}{\log 1.618}, \text{ 其中 } M = \log\left(\frac{\log c_1\epsilon}{\log\ d_0\ c_1}\right).$$

所需总的计算时间是

$$T_s = \frac{mM}{\log 1.618}$$

当 $c \approx c_1$ 或 $c \gg \epsilon, c_1 \gg \epsilon$ 时, $N \approx M$. 此时

$$\frac{T_s}{T_L} \approx \frac{\log 3}{3\log 1.618} = 0.7611$$

而当精确度要求较高时, $c \gg \epsilon, c_1 \gg \epsilon$ 总是成立的, 因而本文算法的计算时间明显要少。另外, 本文算法的迭代公式比较简洁, 勿需开方运算。

我们在 SGI 工作站上分别用两种方法计算了 5 类典型的对称三对角矩阵的特征值。这些测试矩阵有一定的代表意义, 前 4 类选自[4], 第 5 类选自[3].

第 1 类: Toeplitz 矩阵 $[b, a, b]$.

第 2 类: $a_1 = a - b,\ a_i = a,\ i = 2, 3, \cdots, n-1,\ a_n = a + b,\ b_j = b,\ j = 1, 2, \cdots, n$.

第 3 类: $a_i = \begin{cases} a & i \text{ 是奇数时} \\ b & i \text{ 是偶数时}, \end{cases}\quad b_i = 1.$

第 4 类: $a_i = 0,\ b_i = \sqrt{i(n-i)}$.

第 5 类: Wilkinson 矩阵 W_n^+, $b_i = 1$

表 1 给出的是精确度 $\epsilon = 10^{-12}$ 的实验数据。其中 T_1 为本文算法的计算时间, T_2 为 Laguerre 方法的计算时间。

表 1　计算时间比较(单位: s)

		n= 100	n= 200	n= 400	n= 800	n= 1000
Type1	T_1	0. 16	0. 44	1. 62	6. 24	9. 31
a= 4	T_2	0. 24	0. 84	3. 11	13. 01	19. 67
b= 1	T_1/T_2	66. 67%	52. 38%	52. 09%	47. 96%	47. 33%
Type2	T_1	0. 16	0. 49	1. 80	6. 60	10. 19
a= 4	T_2	0. 25	0. 84	3. 17	11. 81	18. 34
b= 1	T_1/T_2	64%	58. 33%	56. 78%	55. 88%	55. 56%
Type3	T_1	0. 18	0. 49	1. 69	6. 12	9. 50
a= 4	T_2	0. 25	0. 90	3. 30	12. 71	19. 86
b= 1	T_1/T_2	72%	54. 44%	51. 21%	48. 86%	47. 83%
Type4	T_1	0. 18	0. 53	1. 91	6. 72	10. 67
	T_2	0. 26	0. 92	3. 39	12. 87	20. 21
	T_1/T_2	69. 23%	57. 61%	56. 34%	52. 21%	52. 80%
Type5	T_1	0. 24	0. 76	2. 41	9. 02	14. 69
	T_2	0. 30	1. 20	4. 10	16. 65	27. 15
	T_1/T_2	80%	63. 33%	58. 78%	54. 17%	54. 11%

从表 1 可以看出, 本文算法的收敛速度明显比文[1] 中的 Laguerre 迭代法快。当问题规模较大时, 要达到同样的精确度, 使用本文算法可以减少 40% 以上的计算时间。

4　结论

虽然本文割线法的收敛阶只有 1. 618, 但每次迭代只需计算一次函数值, 因而总的计算量小于文[1] 中的 Laguerre 迭代法(尽管它的收敛阶是 3) 。理论分析和数值实验的结果均表明, 与 Laguerre 迭代法相比, 采用本文算法所需计算时间可以显著减少。

值得指出的是, 本文算法非常适合并行实现。事实上, 每个特征值的计算是相互独立的, 可以同时进行。

参 考 文 献

1　Li T Y, Zeng Z G. The Laguerre iteration in solving the symmetric tridiagonal eigenproblem. SIAM J Sci Comput, 1994, 15(5): 1145～1173

2　Cuppen J J. A divide-and-conquer method for the symmetric tridiagonal eigenproblem Numer math, 1981, 36: 177～195

3　Wilkinson J H. The algebraic eigenvalue problem, Clarendon Press, oxford, 1965

4　Gregory R T, Karney D L. A collection of matrices for testing computational algorithms. Kobert E. Krieger Publishing Company, Huntington, NY, 1978

5　关治, 陈景良 . 数值计算方法 . 北京: 清华大学出版社, 1990

(责任编辑　张　静)