

解大规模矩阵特征问题的复合正交投影方法^{*}

贾仲孝

(大连理工大学应用数学系, 大连 116024)

摘要 对于求解大规模矩阵特征问题的经典正交投影类方法, 当矩阵非 Hermite 时, Ritz 向量收敛比 Ritz 值收敛要困难得多. 已有一类新的精化正交投影类方法, 它们用精化的近似特征向量取代标准的 Ritz 向量来逼近所求的特征向量. 证明了在某种意义下, 每个精化方法是两个经典方法的复合, 精化近似特征向量满足某个 Hermite 半正定矩阵在同一个子空间上的经典正交投影, 进而, 用特征向量到子空间的距离建立了精化近似特征向量的先验误差界. 结果表明, 精化的近似特征向量和对应的 Ritz 值收敛的充分条件相同.

关键词 经典正交投影 精化正交投影 Ritz 值 Ritz 向量 精化近似特征向量 收敛性

在大量的科学和工程计算中, 都要数值求解大规模矩阵特征问题. 对给定的大规模矩阵 A , 人们经常要计算其一部分特殊的特征对. 数十年来, 使用的最主要方法是经典的正交投影类方法. 该类方法用 A 在某给定子空间上正交投影后得到的 Ritz 对去逼近 A 的某些特征对. 当 A 为 Hermite 矩阵时, 理论和实验都表明这类方法是很有有效的^[1]. 过去 20 年来, 人们花费了大量的精力研究这些方法求解非 Hermite 矩阵特征问题的理论和算法: 如 Arnoldi 方法^[2~4] 和其块版本^[3,5], 子空间迭代法^[3], Davidson 方法和 Jacobi-Davidson 方法^[6] 以及它们的多种变型. 然而, 迄今为止, 大量的数值实验表明, 由经典方法开发出的算法往往很不理想并且经常失败^[7,8].

文献[4]建立了矩阵 A 非 Hermite 时经典正交投影类方法的两个重要结果, 它们给出了 Ritz 值和 Ritz 向量的先验误差界. 随后, 文献[7, 8] 对之进行了详细的分析. 结果表明, 与 Hermite 情形不同, 即使给定的原问题本身是良态的, Ritz 向量收敛也要比对应的 Ritz 值需要多得多的充分条件. 更具体地, Ritz 向量收敛的充分条件要求所有 Ritz 值的条件数一致有界, 而对应的 Ritz 值则仅要求它本身的条件数一致有界. 但是, 对非 Hermite 的 A , 理论上并不能保证所有 Ritz 值的条件数有界. 因此, 即使 Ritz 值收敛, Ritz 向量也可能不收敛, 从而使得方法失败. 这种现象当某个别的 Ritz 值的条件数无界时就可能发生. 这就在理论上成功地解释了当矩阵非 Hermite 时, 经典投影类方法为何效果往往不理想甚至会有失败的现象发生.

为了解决经典正交投影类方法可能不收敛这一问题, 对 Arnoldi 的正交投影方法提出了一

1998-04-08 收稿

^{*} 国家攀登计划、国家自然科学基金(批准号: 19571014)、国家教育委员会博士点基金、教育部优秀年轻教师基金、国家教育委员会归国留学人员科研启动基金和辽宁省自然科学基金资助项目

种全新的精化策略^[1,7], 它和经典正交投影类方法的实质不同之处是只保留 Ritz 值而不要 Ritz 向量, 代之以通过求解某些小型的最佳逼近问题得到称之为精化的近似特征向量. 这类新向量在数学上已不再是 Ritz 向量, 它们可用小型矩阵的奇异值分解有效廉价地计算出来. 该策略被成功运用于块 Arnoldi 方法^[8]. 大量的数值实验表明, 由新方法开发出的精化算法收敛速度要比对应的经典算法快得多, 通常可快几倍至数十倍, 并且经典算法无法解决的实际问题, 精化算法也能很有效地求解. 同时, 精化策略可用于任意的经典正交投影方法, 从而导出一类精化的正交投影方法. 然而, 并没有用统一的方式为这类新方法建立严谨系统的理论, 证明它们为何比经典方法可能具有很大的优越性.

现在引入一些将要用到的记号. 令 A 为 $N \times N$ 的大规模实或复矩阵, 上标 $*$ 表示矩阵或向量的共轭转置, $\kappa(X) = \sigma_{\max}(X)/\sigma_{\min}(X)$ 为矩阵 X 的条件数, 其中 $\sigma_{\max}(X)$, $\sigma_{\min}(X)$ 分别是 X 的最大和最小奇异值, 定义 $\theta(x, y)$ 为单位长向量 x 和 y 间的锐角, $\theta(x, E)$ 是单位长向量 x 和子空间 E 间的锐角, π 是 E 上的正交投影算子. 由定义可知

$$\cos \theta(x, y) = |x^* y| = |y^* x|, \quad \sin \theta(x, E) = \|(I - \pi)x\|, \quad \tan \theta(x, E) = \frac{\|(I - \pi)x\|}{\|\pi x\|},$$

其中 $\|(I - \pi)x\|$ 是 x 和 E 间的距离, 本文所用的范数均为 Euclid 范数.

1 经典正交投影类方法

考虑矩阵特征问题

$$A\varphi = \lambda\varphi, \quad (1)$$

其中 $\|\varphi\| = 1$.

给定 m 维的子空间 E , 经典的正交投影方法是在 E 上寻找满足下面 Rayleigh-Ritz 逼近或 Galerkin 投影的 λ , φ ^[3]:

$$\begin{cases} \varphi \in E, \\ A\varphi - \lambda\varphi \perp E, \end{cases} \quad (2)$$

并用其逼近 A 的某些特征对 λ , φ . λ , φ 称为 A 在 E 上的 Ritz 值和 Ritz 向量.

假设矩阵 $V = (v_1, v_2, \dots, v_m)$ 的列形成 E 的一组标准正交(酉)基底, 则(2)式等价于

$$\begin{cases} B y = \lambda y, \\ \varphi = Vy, \end{cases} \quad (3)$$

其中 $B = V^* A V$, 它是 A 在 E 上以 $\{v_j\}_1^m$ 为基底的投影矩阵, 或称为 A 对 E 的限制在基底 $\{v_j\}_1^m$ 下的矩阵表示式. 因此, 经典正交投影类方法通过求解小型特征问题(3)来得到 m 个特征对 λ , φ 的近似 λ , φ .

不同的子空间 E 导致不同的正交投影方法, 几个最常用的方法均为经典正交投影方法: Arnoldi 方法^[2,3], 块 Arnoldi 方法^[3,3], 子空间迭代法^[1,3], Davidson 方法^[3], Jacobi-Davidson 方法^[6].

对经典正交投影类方法, 一个自然的至关重要的问题是, 当所求的特征向量和子空间 E

1) Jia Z. Some numerical methods for large unsymmetric eigenproblems. Ph D Thesis. Department of Mathematics, University of Bielefeld, Germany, 1994

的距离趋于零, 即 $\sin\theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$ 时, Ritz 对 λ_i, φ_i 是否收敛于特征对 λ_i, φ_i ?

引理 1^[4] 假设 $\sin\theta(\varphi_i, E)$ 随 E 变化收敛于零, 令 $\gamma = \|\pi A(I - \pi)\|$, 则存在 Ritz 值 λ_i , 使得如果 λ_i 的指标为 1, 则有

$$|\lambda_i - \lambda_i| \leq \gamma \|P_i\| \tan\theta(\varphi_i, E) + O(\tan^2\theta(\varphi_i, E)), \quad (4)$$

其中 P_i 为 Ritz 值 λ_i 的谱投影算子. 如果 $A = A^*$, 则

$$|\lambda_i - \lambda_i| \leq \gamma \tan\theta(\varphi_i, E). \quad (5)$$

注意到 $\gamma \leq \|A\|$, 于是从 (4) 式得到 $\lambda_i \rightarrow \lambda_i$ 的充分条件: $\sin\theta(\varphi_i, E)$ 收敛于零, λ_i 的条件数 $\|P_i\|$ 随 E 变化一致有界. 如果 $A = A^*$, 则 $\sin\theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$ 为 $\lambda_i \rightarrow \lambda_i$ 的充分条件. 但当 A 非 Hermite 时, 即使特征值 λ_i 的条件数不大, 也不可能先验地界定 Ritz 值 λ_i 的条件数 $\|P_i\|$ 的大小. 事实上, $\|P_i\|$ 可以任意大, 从而导致经典方法失败.

引理 2^[4] 假设 B 可对角化, λ_i 用来逼近 λ_i , 对 $\lambda_j \neq \lambda_i$ 定义 $d_i = \min |\lambda_i - \lambda_j|$, X_i 是列对应于 $\lambda_j \neq \lambda_i$ 的 Ritz 向量 φ_j 组成的矩阵, 则

$$\sin\theta(\varphi_i, \varphi_i) \leq \left(1 + \frac{\inf_D \text{diag} \kappa(X_i D) (1 + \|P_i\|) \gamma}{d_i}\right) \sin\theta(\varphi_i, E). \quad (6)$$

如果 $A = A^*$, 则

$$\sin\theta(\varphi_i, \varphi_i) \leq \left(1 + \frac{\gamma}{d_i}\right) \sin\theta(\varphi_i, E). \quad (7)$$

由引理 2 可以看到, 当 $A = A^*$ 时, 只要 $\sin\theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$, 则 $\varphi_i \rightarrow \varphi_i$. 这说明 $\sin\theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$ 是 $\varphi_i \rightarrow \varphi_i$ 的充分条件. 然而, 在非 Hermite 情形, $\varphi_i \rightarrow \varphi_i$ 的充分条件不仅要求 $\sin\theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$, 并且要求 $\|P_i\|$ 和 $\inf_D \text{diag} \kappa(X_i D)$ 均须随 E 变化一致有界. 根据引理 1 可知, $\varphi_i \rightarrow \varphi_i$ 的充分条件除了要求 $\lambda_i \rightarrow \lambda_i$ 的充分条件满足外, 还要求矩阵 X_i 的最优条件数也要随 E 变化一致有界. 因此, 即使 $\lambda_i \rightarrow \lambda_i$, 但 $\varphi_i \not\rightarrow \varphi_i$ 也会发生, 因为理论上不可能保证 $\inf_D \text{diag} \kappa(X_i D)$ 随 E 变化一致有界. 进一步分析表明, 如果 $\inf_D \text{diag} \kappa(X_i D)$ 无界, 则至少有一个 $\|P_j\|$ 对 $\lambda_j \neq \lambda_i$ 无界, 反之亦然^[9]. 这说明 Ritz 向量 φ_i 会比 Ritz 值 λ_i 远为病态, 因为前者要求所有 Ritz 值的条件数均一致有界, 而后者仅要求它本身的条件数一致有界. 因此, 如果 A 非 Hermite, 则经典投影类方法可能失败, Ritz 向量的质量要比 Ritz 值的差得多.

2 复合正交投影类方法

前面的分析证明, 在非 Hermite 情形, Ritz 对的收敛性强烈地依赖于小问题 (3) 的性态, φ_i 可能比 λ_i 远为病态, 因为前者的先验误差界 (6) 式涉及到 $\inf_D \text{diag} \kappa(X_i D)$, 而这个因子随 E 变化时的确会趋于无穷. 这将导致一旦有一个 $\lambda_j (\neq \lambda_i)$ 任意病态, 则即使 λ_i 收敛, φ_i 也不收敛的现象发生.

然而, 注意到如果 $\sin\theta(\varphi_i, E)$ 随 E 变化收敛于零, 则在 E 中至少存在一个向量, 如 $\pi\varphi_i$, 收敛于 φ_i . 这说明虽然 φ_i 可能不收敛于 φ_i , 但只要 $\sin\theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$, 则在 E 中必定有 φ_i 的丰富信息. 如前所见, λ_i 的质量要比 φ_i 好得多. 所以, 从现在起, 假设 $\lambda_i \rightarrow \lambda_i$ 的充分条件满足, 即 $\sin\theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$ 且 $\|P_i\|$ 随 E 的变化一致有界. 在此假设下, 为克服经典投影类方法可能的不收敛性和改进方法的整体性能, 希望在子空间 E 中找到新的近似特征向量, 使其满

足两个要求: (i) 理论上, 每个新向量和对应的 Ritz 值收敛的充分条件相同; (ii) 数值计算上, 每个新向量都能有效可靠地计算出来. 显然, 如果能找到满足上述要求的新方法, 则由新方法开发出的算法一定比对应的经典算法优越. 为此, 文献[7, 8] 建议了一种新的精化策略, 它保留原方法中的 Ritz 值, 但用下面的策略寻找新向量, 从而导出一类全新的精化正交投影方法.

对每个 Ritz 值 λ_i , 寻找单位长向量 $\tilde{u}_i \in E$, 使得它满足最优性质

$$\|(A - \lambda_i I)\tilde{u}_i\| = \min_{u \in E, \|u\|=1} \|(A - \lambda_i I)u\|, \quad (8)$$

并用之逼近 φ_i . 称 $\tilde{u}_i$ 为 A 在 E 中对应于 λ_i 的精化近似特征向量. 显然, $\|(A - \lambda_i I)\tilde{u}_i\| \leq \|(A - \lambda_i I)\varphi_i\|$, 所以 $\tilde{u}_i$ 至少同 φ_i 一样好. $\tilde{u}_i$ 可视为 φ_i 关于 λ_i 和 Euclid 范数在 E 上的最佳逼近.

(2)和(8)式给出了 E 上如下的精化正交投影类方法:

$$\begin{cases} \varphi_i, \tilde{u}_i \in E, \\ (A\varphi_i - \lambda_i \varphi_i) \perp E, \\ \|(A - \lambda_i I)\tilde{u}_i\| = \min_{u \in E, \|u\|=1} \|(A - \lambda_i I)u\|, \end{cases} \quad (9)$$

它们用 $\lambda_i, \tilde{u}_i$ 逼近 λ_i, φ_i . 注意到不必在(9)式中计算 φ_i .

注1 假设 V 为酉矩阵, 则(8)式等价于

$$\|(A - \lambda_i I)\tilde{u}_i\| = \min_{z \in C^m, \|z\|=1} \|(A - \lambda_i I)Vz\|. \quad (10)$$

注2 (9)式对计算特征值而言仍是经典的正交投影方法, 但对计算特征向量则不再如此.

注3 实际上, (8)式中 Ritz 值 λ_i 可用其他任意合理的近似特征值代替, 如调和 Ritz 值^[6, 10, 11]或调和 Ritz 向量的 Rayleigh 商^[10, 11].

为了研究上述精化正交投影类方法的本质和特性并与经典正交投影方法进行比较, 考虑下面两个重要和实质的问题.

问题1 精化投影类方法与经典投影类方法间的关系是什么?

问题2 如何用 $\sin\theta(\varphi_i, E)$ 建立精化近似特征向量 $\tilde{u}_i$ 的误差 $\sin\theta(\varphi_i, \tilde{u}_i)$ 的先验界? $\tilde{u}_i \rightarrow \varphi_i$ 的充分条件是什么?

令 $\sigma_{1,i} \leq \sigma_{2,i} \leq \dots \leq \sigma_{m,i}$ 为矩阵 $(A - \lambda_i I)V$ 的奇异值, $\sigma_{1,i} \leq \sigma_{2,i} \leq \dots \leq \sigma_{N,i}$ 为矩阵 $A - \lambda_i I$ 的奇异值, 定义 ψ 为对应于 $\sigma_{1,i}$ 的右奇异向量, 即 $\sigma_{1,i} = \|(A - \lambda_i I)\psi\|$, 则 ψ 可视为 φ_i 关于 λ_i 和 Euclid 范数在整个 N 维复空间上的最佳逼近. 显然, 当 $\lambda_i = \lambda_i$ 时, $\psi = \varphi_i$. 注意到由(9)式有 $\sigma_{1,i} = \|\tilde{r}_i\| = \|(A - \lambda_i I)\tilde{u}_i\|$.

定理1 残量范数 $\sigma_{1,i}$ 和精化近似特征向量 $\tilde{u}_i$ 满足经典的正交投影

$$\begin{cases} \tilde{u}_i \in E, \\ ((A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)\tilde{u}_i - \sigma_{1,i}^2 \tilde{u}_i) \perp E, \end{cases} \quad (11)$$

进而, $\tilde{u}_i$ 逼近 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 的特征向量 ψ_i .

证 由(8)和(10)式可见 $\sigma_{1,i}$ 和 $\tilde{u}_i$ 满足

$$H\tilde{z}_i = \sigma_{1,i}^2 \tilde{z}_i, \quad \tilde{u}_i = V\tilde{z}_i, \quad (12)$$

其中

$$H_i = V^*(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)V \quad (13)$$

是 $m \times m$ 的小型 Hermite 半正定矩阵. 显然, H_i 是矩阵 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 在 E 上的投影矩阵, 即 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 对 E 的限制在基底 V 下的矩阵表示式. 所以 H_i 的特征值是矩阵 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 在 E 上的 Ritz 值, 对应的 Ritz 向量等于 V 乘以 H_i 的特征向量, 它们是 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 的某 m 个特征对的近似. 特别地, 注意到 $\sigma_{1,i}^2$, ψ 是 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 的最小特征对, 而 $\tilde{\sigma}_{1,i}^2$, $\tilde{u}_i$ 是 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 在 E 上的最小 Ritz 对, 故 $\tilde{\sigma}_{1,i}^2$, $\tilde{u}_i$ 满足经典的正交投影

$$\begin{cases} \tilde{u}_i \in E, \\ ((A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)\tilde{u}_i - \tilde{\sigma}_{1,i}^2 \tilde{u}_i) \perp E. \end{cases}$$

由经典理论^[1]可知, $\tilde{\sigma}_{1,i}^2$, $\tilde{u}_i$ 是逼近 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 的特征对 $\sigma_{1,i}^2$, ψ 的 Ritz 对.

注 4 仅需要 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 在 E 上的 Ritz 对 $\tilde{\sigma}_{1,i}^2$, $\tilde{u}_i$ 并用之逼近其最小特征值 $\sigma_{1,i}^2$ 和对应的特征向量 ψ .

定理 1 解决了问题 1, 证明了 (9) 式是两个经典的正交投影方法的复合, 其中 Ritz 值仍用原经典方法计算而每个精化向量 $\tilde{u}_i$ 则通过在同一个子空间 E 上实现 Hermite 矩阵 $(A - \lambda_i I)^* \circ (A - \lambda_i I)$ 的经典正交投影来获得. 然而, 从数学上来讲, 必须指出, 在经典正交投影方法的意义下, (11) 式本身是用 $\tilde{u}_i$ 直接逼近 ψ 而不是所求的 A 的特征向量 φ_i 的. 这意味着解决问题 2 是不平凡的和困难的, 因为在 ψ 和 φ_i 之间存在明显的漏洞, 使得无法直接应用关于经典投影类方法的结果. 为填补该漏洞, 需要两个引理.

引理 3 假设 A 可对角化, λ_j , φ_j ($j = 1, 2, \dots, N$) 是其特征对, 假设 μ_i , w_i 是 A 的一个近似特征对且 $\|w_i\| = 1$. 令 $r_i = Aw_i - \mu_i w_i$, 设 λ_i 是最接近于 μ_i 的特征值, 定义 $g_i = \min_{\lambda_j \neq \lambda_i} |\lambda_j - \mu_i|$, X_i 是由对应于那些 $\lambda_j \neq \lambda_i$ 的特征值的特征向量为列所形成的矩阵, 则存在对应于 λ_i 的范数为 1 的特征向量 $\varphi = P_i w_i / \|P_i w_i\|$ 和 $\beta_i = \|P_i w_i\|$, 使得

$$\|w_i - \beta_i \varphi\| \leq \frac{\inf_{D \text{ diag}} \kappa(X_i D)(1 + \|P_i\|)}{g_i} \|r_i\|, \quad (14)$$

$$\sin \theta(\varphi, w_i) \leq \frac{\inf_{D \text{ diag}} \kappa(X_i D)(1 + \|P_i\|)}{g_i} \|r_i\|, \quad (15)$$

其中 P_i 是对应于按重数计数的特征值 λ_i 的谱投影算子.

证 如果 w_i 是 A 的对应于 λ_i 的一个准确特征向量, 则结论平凡成立. 所以, 不失一般性, 假设 w_i 不是对应于 λ_i 的特征向量.

设 λ_i 是 s 重的, 不妨令 $\lambda_i = \lambda_{i+1} = \dots = \lambda_{i+s-1}$, 定义 $\Phi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N)$ 和 $T^* = (t_1, t_2, \dots, t_N)^* = \Phi^{-1}$, 则 T 的列是 A 的左特征向量, 因此, 对应于 λ_i 的谱投影算子 P_i 可表示成

$$P_i = (\varphi_i, \dots, \varphi_{i+s-1})(t_i, \dots, t_{i+s-1})^*.$$

定义 $P_j = \varphi_j t_j^*$, $j = 1, 2, \dots, i-1, i+s, \dots, N$, 则 P_j 是对应于那些 $\lambda_j \neq \lambda_i$ 的特征值的谱投影算子. 显然, 有

$$P_j P_i = \delta_{ji} P_i,$$

$$P_i + \sum_{j=1}^{i-1} P_j + \sum_{j=i+s}^N P_j = I, \quad (16)$$

因此

$$\begin{aligned} r_i &= (A - \mu_i I) \left(P_i + \sum_{j=1}^{i-1} P_j + \sum_{j=i+s}^N P_j \right) w_i = \\ &= (\lambda_i - \mu_i) P_i w_i + \sum_{\substack{j \neq \lambda_i \\ \lambda_j \neq \lambda_i}} (\lambda_j - \mu_i) P_j w_i. \end{aligned}$$

用 $I - P_i$ 前乘上式两端后有

$$(I - P_i) r_i = \sum_{\substack{j \neq \lambda_i \\ \lambda_j \neq \lambda_i}} (\lambda_j - \mu_i) P_j w_i.$$

定义矩阵 $Z_i = (P_1 w_i, \dots, P_{i-1} w_i, P_{i+s} w_i, \dots, P_N w_i)$, 则由文献[4]中的引理 3.9 可得

$$\| (I - P_i) r_i \| \geq \frac{g_i}{\inf_{D \text{ diag}} \kappa(Z_i D)} \left\| \sum_{\substack{j \neq \lambda_i \\ \lambda_j \neq \lambda_i}} P_j w_i \right\|,$$

其中 D 是非奇异的对角矩阵. 另一方面,

$$\| (I - P_i) r_i \| \leq \| (I - P_i) \| \| r_i \| \leq (1 + \| P_i \|) \| r_i \|.$$

由(16)式可得

$$\| (I - P_i) w_i \| = \left\| \sum_{\substack{j \neq \lambda_i \\ \lambda_j \neq \lambda_i}} P_j w_i \right\|.$$

因此, 结合上面的 3 个关系式后有

$$\| (I - P_i) w_i \| \leq \frac{\inf_{D \text{ diag}} \kappa(Z_i D) (1 + \| P_i \|)}{g_i} \| r_i \|.$$

令 $\varphi = P_i w_i / \| P_i w_i \|$, 它显然属于子空间 $\text{span}\{\varphi_i, \dots, \varphi_{i+s-1}\}$ 且是对应于 λ_i 的范数为 1 的一个特征向量. 由 $P_j (j=1, \dots, i-1, i+s, \dots, N)$ 的定义, 显然, 如果 $w_i \neq \varphi$, 则 Z_i 的第 j 列是对应于那些 $\lambda_j \neq \lambda_i$ 的特征值的特征向量 φ_j 的倍数. 所以, 根据 X_i 的定义, 有

$$\inf_{D \text{ diag}} \kappa(Z_i D) = \inf_{D \text{ diag}} \kappa(X_i D). \quad (17)$$

因此(14)式成立, 其中 $\beta_i = \| P_i w_i \|$.

注意到由定义可知, $\sin \theta(\varphi, w_i)$ 是 φ 和 w_i 的距离, 因此有

$$\sin \theta(\varphi, w_i) = \min_{\beta} \| w_i - \beta \varphi \| = \| w_i - \varphi^* w_i \varphi \| \leq \| w_i - P_i w_i \| = \| (I - P_i) w_i \|,$$

这证明了(15)式成立.

引理 3 表明, 近似特征向量的误差和精度能用近似特征对的残量范数估计和度量.

引理 4 令 λ_i 是最接近于 μ_i 的特征值, 则 $A - \mu_i I$ 的最小奇异值满足

$$\sigma_{\min}(A - \mu_i I) \leq |\lambda_i - \mu_i|; \quad (18)$$

如果 $A = A^*$, 则

$$\sigma_{\min}(A - \mu_i I) = |\lambda_i - \mu_i|. \quad (19)$$

证 令 $A - \lambda_i I = QRQ^*$ 为 $A - \lambda_i I$ 的 Schur 分解, 其中 Q 是酉矩阵, R 是对角元按递减顺序排列的上三角矩阵. 由于 $A - \lambda_i I$ 是奇异矩阵, 因此 R 必是奇异矩阵, 且其最后一个对角元 $r_{NN} = 0$. 注意到

$$A - \mu_i I = A - \lambda_i I + (\lambda_i - \mu_i) I = QRQ^* + (\lambda_i - \mu_i) I = QRQ^*,$$

其中 R 除对角元 $\tilde{r}_{jj} = r_{jj} + \lambda_i - \mu_i (j = 1, 2, \dots, N)$ 外, 其余元素与 R 相同. 显然 $\tilde{r}_{NN} = \lambda_i - \mu_i$, 所以 (18) 式成立, 因为 $\sigma_{\min}(A - \mu_i I) = \sigma_{\min}(R) \leq |\lambda_i - \mu_i|$.

如果 $A = A^*$, 则 R 和 R 均为对角矩阵, 所以 (19) 式成立.

定理 2 假设 A 可对角化, $\sin \theta(\varphi_i, E)$ 随 E 变化趋于零, 定义 $\gamma = \|\pi A(I - \pi)\|$, 对 $\lambda_j \neq \lambda_i$, 定义 $\tilde{d}_i = \min |\lambda_i - \lambda_j|$, P_i, P_i 分别为对应于特征值 λ_i 和 Ritz 值 λ_i 的谱投影算子, X_i 是列对应于 $\lambda_j \neq \lambda_i$ 的特征向量 φ_j 组成的矩阵, 令 $\alpha_i = \|\pi(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)(I - \pi)\|$, $\tilde{\sigma}_{j,i} > \sigma_{1,i}$ 为 $(A - \lambda_i I)^V$ 次最小奇异值, 则定义

$$\xi_i = \frac{\gamma \|P_i\| \inf_{D \text{ diag}} \kappa(X_i D) (1 + \|P_i\|)}{\tilde{d}_i}$$

并忽略高阶项 $O(\sin^2 \theta(\varphi_i, E))$, 渐近地有

$$\sin \theta(\varphi_i, \tilde{u}_i) \lesssim \left[\left(2 + \frac{\alpha_i}{\tilde{\sigma}_{j,i}^2 - \sigma_{1,i}^2} \right) \xi_i + 1 + \frac{\alpha_i}{\tilde{\sigma}_{j,i}^2 - \sigma_{1,i}^2} \right] \sin \theta(\varphi_i, E); \quad (20)$$

如果 $A = A^*$, 则

$$\sin \theta(\varphi_i, \tilde{u}_i) \lesssim \left[1 + \frac{2\gamma}{\tilde{d}_i} + \frac{\alpha_i}{\tilde{\sigma}_{j,i}^2 - \sigma_{1,i}^2} \left(1 + \frac{\gamma}{\tilde{d}_i} \right) \right] \sin \theta(\varphi_i, E). \quad (21)$$

证 根据定理 1, 因为 (11) 式是 Hermite 半正定矩阵 $(A - \lambda_i I)^*(A - \lambda_i I)$ 在 E 上的经典正交投影, 并用 $\sigma_{1,i}^2, \tilde{u}_i$ 逼近其特征对 $\sigma_{1,i}^2, \psi_i$, 所以由 (7) 式可知

$$\sin \theta(\psi_i, \tilde{u}_i) \leq \left[1 + \frac{\alpha_i}{\tilde{\sigma}_{j,i}^2 - \sigma_{1,i}^2} \right] \sin \theta(\psi_i, E). \quad (22)$$

由定义, $\sigma_{1,i} = \|(A - \lambda_i I)\psi_i\|$, 因此, 根据引理 3, 4 和 1, 有

$$\begin{aligned} \sin \theta(\varphi_i, \psi_i) &\leq \frac{\inf_{D \text{ diag}} \kappa(X_i D) (1 + \|P_i\|)}{\tilde{d}_i} \sigma_{1,i} \leq \\ &\frac{\inf_{D \text{ diag}} \kappa(X_i D) (1 + \|P_i\|)}{\tilde{d}_i} |\lambda_i - \lambda_i| \leq \\ &\gamma \|P_i\| \frac{\inf_{D \text{ diag}} \kappa(X_i D) (1 + \|P_i\|)}{\tilde{d}_i} \tan \theta(\varphi_i, E) + O(\tan^2 \theta(\varphi_i, E)). \end{aligned} \quad (23)$$

所以, 由假设可推出 $\sin \theta(\varphi_i, \psi_i) \rightarrow 0$, 这是因为 $\|P_i\| \tan \theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$ 且上式右端其他因子是有界的.

注意到三角不等式

$$\theta(\psi_i, E) \leq \theta(\varphi_i, E) + \theta(\varphi_i, \psi_i),$$

并且 $\theta(\varphi_i, \psi_i) \rightarrow 0$ (因为从 (23) 式可知 $\sin \theta(\varphi_i, \psi_i) \rightarrow 0$), 因此, 当 $\sin \theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$ 时, $\theta(\varphi_i, E) + \theta(\varphi_i, \psi_i)$ 是一个锐角. 所以

$$\sin \theta(\psi_i, E) \leq \sin(\theta(\varphi_i, E) + \theta(\varphi_i, \psi_i)) \leq \sin \theta(\varphi_i, E) + \sin \theta(\varphi_i, \psi_i). \quad (24)$$

由假设, 因为 $\|P_i\| \tan \theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$ 意味着 $\sin \theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$, 所以对小的 $\sin \theta(\varphi_i, E)$, 利用 Taylor 展开可得

$$\tan \theta(\varphi_i, E) = \frac{\sin \theta(\varphi_i, E)}{\sqrt{1 - \sin^2 \theta(\varphi_i, E)}} =$$

$$\sin \theta(\varphi_i, E) \left[1 + \frac{1}{2} \sin^2 \theta(\varphi_i, E) + O(\sin^4 \theta(\varphi_i, E)) \right]. \quad (25)$$

根据(23)和(25)式, 得到

$$\begin{aligned} \sin \theta(\varphi_i, \psi) &\leq \frac{\gamma \|P_i\| \inf_D \text{diag} \kappa(XD)(1 + \|P_i\|)}{\bar{d}_i} \tan \theta(\varphi_i, E) + O(\tan^2 \theta(\varphi_i, E)) = \\ &\frac{\gamma \|P_i\| \inf_D \text{diag} \kappa(XD)(1 + \|P_i\|)}{\bar{d}_i} \sin \theta(\varphi_i, E) + O(\sin^2 \theta(\varphi_i, E)). \end{aligned} \quad (26)$$

因此, 由(24)式可得

$$\sin \theta(\psi, E) \leq \left[1 + \frac{\gamma \|P_i\| \inf_D \text{diag} \kappa(XD)(1 + \|P_i\|)}{\bar{d}_i} \right] \sin \theta(\varphi_i, E) + O(\sin^2 \theta(\varphi_i, E)). \quad (27)$$

注意到三角不等式

$$\theta(\varphi_i, \tilde{u}_i) \leq \theta(\varphi_i, \psi) + \theta(\psi, \tilde{u}_i),$$

所以结合(22)、(26)和(27)式, 有

$$\begin{aligned} \sin \theta(\varphi_i, \tilde{u}_i) &\leq \sin \theta(\varphi_i, \psi) + \sin \theta(\psi, \tilde{u}_i) \leq \\ &\frac{\gamma \|P_i\| \inf_D \text{diag} \kappa(XD)(1 + \|P_i\|)}{\bar{d}_i} \sin \theta(\varphi_i, E) + \\ &\left[1 + \frac{\alpha_i}{\bar{\sigma}_{j,i}^2 - \sigma_{l,i}^2} \right] \left[1 + \frac{\gamma \|P_i\| \inf_D \text{diag} \kappa(XD)(1 + \|P_i\|)}{\bar{d}_i} \right] \sin \theta(\varphi_i, E) + \\ &O(\sin^2 \theta(\varphi_i, E)) = \\ &\left[\left(2 + \frac{\alpha_i}{\bar{\sigma}_{j,i}^2 - \sigma_{l,i}^2} \right) \frac{\gamma \|P_i\| \inf_D \text{diag} \kappa(XD)(1 + \|P_i\|)}{\bar{d}_i} + 1 + \right. \\ &\left. \frac{\alpha_i}{\bar{\sigma}_{j,i}^2 - \sigma_{l,i}^2} \right] \sin \theta(\varphi_i, E) + O(\sin^2 \theta(\varphi_i, E)). \end{aligned}$$

在上式中忽略高阶项 $O(\sin^2 \theta(\varphi_i, E))$ 后就证明了(20)式.

如果 $A = A^*$, 利用引理3, 4和1中 $A = A^*$ 时的相应结果重复以上证明就可得到(21)式.

注意到 $\alpha_i \leq \|A - \lambda_i I\|^2 = \sigma_{N,i}^2$ 是随 E 变化一致有界的量, 于是可见除了 $\sin \theta(\varphi_i, E)$ 外, 先验界(20)式仅依赖于(1)式本身的性态和 λ_i 的条件数, 而所有其他 Ritz 值 $\lambda_j (\neq \lambda_i)$ 的条件数都消失了. 因此, $\tilde{u}_i \rightarrow \varphi_i$ 的充分条件是 $\sin \theta(\varphi_i, E) \rightarrow 0$ 且 $\|P_i\|$ 随 E 变化一致有界. 所以 $\tilde{u}_i \rightarrow \varphi_i$ 和 $\lambda_i \rightarrow \lambda_i$ 的充分条件是相同的.

参 考 文 献

- 1 Parlett B N. The Symmetric Eigenvalue Problem. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1980
- 2 Amoldi W E. The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem. Quart Appl Math, 1951, 9: 17~29
- 3 Saad Y. Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems. Manchester: Manchester University Press, 1992

- 4 Jia Z. The convergence of generalized Lanczos methods for large unsymmetric eigenproblems. *SIAM J Matrix Anal Appl*, 1995, 16: 843 ~ 862
- 5 Jia Z. Generalized block Lanczos methods for large unsymmetric eigenproblems. *Numer Math*, 1998, 80: 239 ~ 266
- 6 Sleijpen G L G, Van der Vorst H A. A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems. *SIAM J Matrix Anal Appl*, 1996, 17: 401 ~ 425
- 7 Jia Z. Refined iterative algorithms based on Arnoldi's process for large unsymmetric eigenproblems. *Linear Algebra Appl*, 1997, 259: 1 ~ 23
- 8 Jia Z. A refined iterative algorithm based on the block Arnoldi process for large unsymmetric eigenproblems. *Linear Algebra Appl*, 1998, 270: 171 ~ 189
- 9 Wilkinson J H. *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford: Oxford Univ Press, 1965
- 10 Morgan R B. Computing interior eigenvalues of large matrices. *Linear Algebra Appl*, 1991, 154/ 156: 289 ~ 309
- 11 Paige C C, Parlett B N, van der Vorst H A. Approximate solutions and eigenvalue bounds from Krylov subspaces. *Num Lin Alg with Appl*, 1995, 2: 115 ~ 134
- 12 Golub G H, van Loan C F. *Matrix Computations*. 2nd ed. Baltimore: Hopkins Univ Press, 1989