第 34 卷 第 11 期 计 算 机 工 程 2008 年 6 月
Vol.34 No.11 Computer Engineering June 2008
·软件技术与数据库· 文章编号：1000—3428(2008)11—0083—03 文献标识码：A 中图分类号：TP311

求解矩阵特征值及特征向量的新方法

夏慧明，周永权
(广西民族大学数学与计算机科学学院，南宁 530006)

摘 要：提出一种基于进化策略求解矩阵特征值及特征向量的新方法。该方法在进化过程中通过重组、突变、选择对个体进行训练学习，向最优解逼近。当达到预先给定的误差时，程序终止，得到最优解。实验结果表明，与传统方法相比，该方法的收敛速度较快，求解精度提高了 10 倍。该算法能够快速有效地获得任意矩阵对应的特征值及特征向量。
关键词：实矩阵；特征值；特征向量；进化策略

New Method for Solving Matrix Eigenvalues and Eigenvectors

XIA Hui-ming, ZHOU Yong-quan
(College of Math and Computer Science, Guangxi University for Nationalities, Nanning 530006)

【**Abstract**】The paper proposes a new evolution strategy method for solving matrix eigenvalues and eigenvectors. The method studies the individuals by reorganization, mutation, selection in the evolution process and approaches to the optimal solution. When the error which is given beforehand achieved, the procedure is terminated and obtains the best answer. Several experimental results show that the method is more efficient and feasible in solving the eigenvalues and eigenvectors of arbitrary matrix. It is found that the accuracy is ten times higher than the traditional method and the convergent speed is quick.
【**Key words**】real matrix; eigenvalues; eigenvectors; evolution strategy

1 概述

在科学和工程计算中，求解矩阵的特征值及特征向量，是最普遍的问题之一。在许多应用领域，经常使用矩阵的特征值及特征向量，如主成分分析、因子分析等都必须计算相关矩阵的特征值和特征向量。目前，关于特征值、特征向量问题的数值解法有两种：变换法和迭代法。其中，变换法是直接对矩阵进行处理，通过变换，使之变成较容易求解特征值、特征向量的新矩阵，但是变换方法常常存贮量较大，计算速度较慢；迭代法是通过一系列矩阵向量乘积而求得特征值和特征向量，常用的方法有 Lanczos 法、Davidson 法等。虽然这些方法在求解时都取得了巨大的成功，但是普遍存在着计算精度低、收敛速度慢及泛化能力弱等缺陷。

进化策略(Evolution Strategies, ES)[1-2]是由 Rechenberg 等为研究风洞中的流体力子问题而提出的。它是一种基于生物界自然选择和自然遗传机制的计算方法，利用生物变异的思想来随机改变参数值，并获得了较好的结果。

2 特征值与特征向量[3]

设 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 方阵，$\boldsymbol{Y}$ 是一个 n 维向量，乘积 $\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{AY}$ 可以看成是 n 维空间内的线性变换。若能找到一个标量 λ，使得存在一个非零向量 $\boldsymbol{Y}$，满足 $\boldsymbol{AY}=\lambda\boldsymbol{Y}$，则可以认为线性变换 $T(\boldsymbol{Y})=\boldsymbol{AY}$ 将 $\boldsymbol{Y}$ 映射为 $\lambda\boldsymbol{Y}$，此时称 $\boldsymbol{Y}$ 是对应于特征值 λ 的特征向量。通常标量 λ 和向量 $\boldsymbol{Y}$ 可以是复数。为了简单起见，本文特征值考虑在复数范围内，特征向量考虑在实数范围内。

定义 1 如果 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 实矩阵，则它存在 n 个特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$，其中，$\lambda_i(i=1,2,\cdots,n)$ 为实数或复数。

定义 2 如果 λ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值并且非零向量 $\boldsymbol{V}$ 具有如下特性：$\boldsymbol{AV}=\lambda\boldsymbol{V}$，则 $\boldsymbol{V}$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对应于特征值 λ 的特征向量。

3 进化策略算法

算法实现过程如下：

(1)确定问题的表达方式。表达方式中个体由目标变量 X 和标准差 σ 两部分组成，每部分又可以有 n 个分量，即：$(X,\sigma)=((x_1,x_2,\cdots,x_i,\cdots,x_n),(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_i,\cdots,\sigma_n))$。

X 和 σ 之间的关系是：$\begin{cases}\sigma_i^{'}=\sigma_i\cdot\exp(r^{'}\cdot N(0,1)+r\cdot N_i(0,1))\\ x_i^{'}=x_i+\sigma_i\cdot N_i(0,1)\end{cases}$

其中，(x_i,σ_i) 为父代个体的第 i 个分量；$(x_i^{'},\sigma_i^{'})$ 为子代新个体的第 i 个分量；$N(0,1)$ 为服从标准正态分布的随机数；$N_i(0,1)$ 为针对第 i 个分量重新产生一次符合标准正态分布的随机数；$r^{'}$ 为全局系数；r 为局部系数。上式表明，新个体是在旧个体基础上随机变化而来。

(2)随机生成初始群体：进化策略中初始群体由 μ 个个体组成。初始个体是随机生成的，也可以从某个初始点 $(X(0),\sigma(0))$ 出发，通过多次突变产生 μ 个初始个体，该初始点可从可行域中用随机方法选取。初始个体的标准差 $\sigma(0)=3.0$。

(3)进化策略的突变是在旧个体基础上添加一个随机量，

基金项目：国家自然科学基金资助项目(60461001)；广西自然科学基金资助项目(0542048)；广西民族大学重大项目资助课题
作者简介：夏慧明(1981－)，男，硕士，主研方向：进化计算及应用；周永权，教授、博士
收稿日期：2007-06-15 **E-mail**：huimingxia1981@126.com

生成新个体，突变过程为 $\begin{cases}\sigma_i^{'}=\sigma_i\cdot\exp(r^{'}\cdot N(0,1)+r\cdot N_i(0,1))\\ x_i^{'}=x_i+\sigma_i\cdot N_i(0,1)\end{cases}$。

其中，$r=(\sqrt{2\sqrt{n}})^{-1}$；$r^{'}=(\sqrt{2n})^{-1}$；$n$ 是个体中所含分量的数目。通常，r 及 $r^{'}$ 取为 1。

4 求解步骤

基于进化策略求矩阵特征值及特征向量的步骤如下：

步骤 1 求特征值

(1)确定矩阵特征值个体的表达方式：表达式中个体由目标变量 X 和标准差 σ 两个部分组成，因为是在复数范围内求特征值，所以每个个体有 2 个分量，分别代表特征值的实部和虚部，即 $(X,\sigma)=((x_1,x_2),(\sigma_1,\sigma_2))$。

(2)随机生成特征值初始群体：初始群体由 μ 个个体组成，初始个体是随机生成的，设初始个体的标准差 $\sigma(0)=3.0$。

(3)计算适应度：特征值是在满足将特征值代入特征多项式后，即多项式 $e=\det(\lambda I-A)$ 的值越小时，则特征值的近似程度越好。取适应度函数为：$f=1/(1+e^2)$，适应度值越接近 1，特征值越优良，其中，$0<f<1$，终止条件选择一个很接近 1 的值 ε，当适应度值大于 ε 时终止。

(4)若满足条件，则终止，选出最优解。否则，继续向下进行。

(5)根据进化策略，采用以下 4 步产生新群体：

1)重组：从父代个体中随机取出两个个体，交换目标变量和随机因子，产生新个体。目标变量与随机因子均采用黄金分割重组。

2)突变：对重组后的个体添加随机变量，按照式 $\sigma_i^{'}=\sigma_i\cdot\exp(r^{'}\cdot N(0,1)+r\cdot N_i(0,1))$ 与 $x_i^{'}=x_i+\sigma_i\cdot N_i(0,1)$ 产生新个体。其中，r 及 $r^{'}$ 取为 1，$i=1,2$。

3)计算个体适应度 f。

4)选择：采用 (μ,λ) 选择策略，挑选优良的个体作为进化的结果。

(6)反复执行第(5)步，直到满足终止条件，选择最佳的个体作为进化策略的结果，即所求的最优特征值。

步骤 2 求特征向量

(1)对步骤 1 中所求的特征值进行整理，设误差限 $\eta=0.0000000001$，若特征值的虚部的绝对值小于 η 时，则记该特征值为实数。从步骤 1 中找出所有的实特征值，求实特征值相应的特征向量。

(2)随机生成 μ 个初始群体，每一个个体 (X,σ) 包含 n 个分量(n 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的阶数)，即

$$(X,\sigma)=((x_1,x_2,\cdots,x_i,\cdots x_n),(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_i,\cdots,\sigma_n))$$

其中，$(x_1,x_2,\cdots,x_i,\cdots,x_n)$ 为特征向量个体。初始个体的标准差取 $\sigma(0)=3.0$。

(3)计算适应度：取适应度函数为 $g=1/(1+d)$，将特征向量 $\boldsymbol{X}$ 代入线性方程组：$\boldsymbol{AX}=\lambda\boldsymbol{X}$，经整理可写成：$\begin{cases}f_1(\boldsymbol{X})=0\\ f_2(\boldsymbol{X})=0\\ \quad\vdots\\ f_n(\boldsymbol{X})=0\end{cases}$。然后，令 $d=\sum_{i=1}^{n}f_i^2(\boldsymbol{X})$，若适应度值越接近 1，则表示特征向量越优($0<g<1$)。终止条件选择一个很接近 1 的值 ε，当适应度值大于 ε 时终止。

(4)若满足条件，则终止，选出最优解。否则，继续向下执行。

(5)根据进化策略，采用以下 4 步产生新群体：

1)重组：从父代个体中随机取出两个个体，交换目标变量和随机因子，产生新个体。目标变量与随机因子均采用黄金分割重组。

2)突变：对重组后的个体添加随机变量，按照式 $\sigma_i^{'}=\sigma_i\cdot\exp(r^{'}\cdot N(0,1)+r\cdot N_i(0,1))$ 与 $x_i^{'}=x_i+\sigma_i\cdot N_i(0,1)$ 产生新个体。其中，r 及 $r^{'}$ 取为 1，$i=1,2,\cdots,n$。

3)计算个体适应度 g。

4)选择：采用 (μ,λ) 选择策略，挑选优良的个体作为进化的结果。

(6)反复执行第(5)步，直到满足终止条件，选择最佳个体作为进化策略结果，即为与实特征值相对应的最优特征向量。

5 仿真实例

为了验证本文算法在求解矩阵特征值与特征向量时的正确性，适应度函数分别取为：(1)求特征值时取 $f=1/(1+e^2)$，其中，$e=\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})$；(2)求特征向量时取 $g=1/(1+d)$，其中，$d=\sum_{i=1}^{n}f_i^2(\boldsymbol{X})$。根据上节算法的思想，当 f 与 g 的值越接近 1 时，表示特征值、特征向量与精确解间的误差越小；(3)以下算例，均采用 (μ,λ) 选择策略，其中，$\mu=20$；$\lambda=7\mu=140$，终止条件均取 $\varepsilon=0.999\,999\,999\,9$；(4)精确解由 Maple 软件求得。

例 1 求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-3&1&-1\\-7&5&-1\\-6&6&-2\end{bmatrix}$ 的特征值及与实特征值相对应的特征向量。

由本文算法，可求出矩阵的特征值及与实特征值相对应的特征向量，结果见表 1。

表 1 复数域内特征值与实特征值相对应的特征向量

	精确解	Matlab所求解[3]	同步求解法[4]	本文算法
特征值	4	4.000 000 000 000 00	4	4.000 000 000 000 00 +0.000 000 000 000 00i
	-2	–2.000 000 052 856 91	-2	–2.000 000 000 000 82 +0.000 000 000 000 14i
	-2	–1.999 999 947 143 091	-2	–1.999 999 999 999 18 –0.000 000 000 000 14i
特征向量	$\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0.00000000125825\\0.99999999853348\\1.00000000000001\end{pmatrix}$
	$\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1.00000000000000\\1.00000000000000\\0.00000005285691\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1.00000000000000\\1.00000000016825\\0.00000005703648\end{pmatrix}$
	$\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1.00000000000000\\1.00000000000000\\-0.00000005285691\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1.00000000034141\\1.00000000000000\\-0.00000006015755\end{pmatrix}$

此例中含有一个二重特征值-2，从表 1 中可以看出本文算法求解的特征值与 Matlab 所求解相比最大误差为 10^{-8}，与文献[4]中的同步求解法所得解及精确解间的最大误差为 10^{-13}，优于 Matlab 法；求特征向量时，与 Matlab 所求解相比本文最大误差为 10^{-9}，与文献[4]中的同步求解法所求解及精确解间的最大误差为 10^{-8}。由此例可看出利用本文算法在求解含重特征值时仍然是有效的。图 1 和图 2 给出了所求特征值及与实特征值相对应的特征向量的适应度函数值随迭代

次数变化的曲线，从图中可以看出所求近似解的变化趋势及收敛速度。

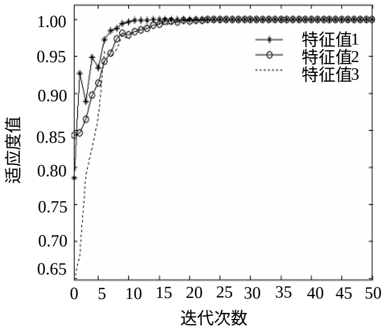

图 1　特征值对应的适应度函数变化曲线

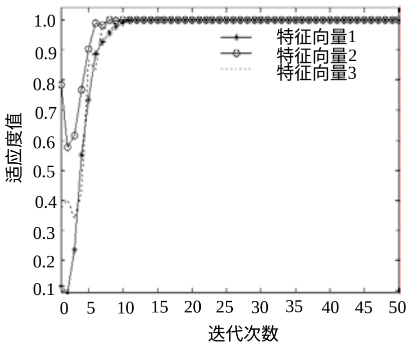

图 2　特征向量对应的适应度函数变化曲线

例 2 求矩阵 $A=\begin{bmatrix}10 & 2.5 & 4 & 9\\ 2.5 & 10 & 3 & 7\\ 0 & 1 & 6 & 2\\ 0 & 0 & 2 & 6\end{bmatrix}$ 的特征值及与实特征值相对应的特征向量。

利用上节算法，所求特征值及与实特征值相对应的特征向量如表 2 所示。

表 2　复数域内特征值与实特征值相对应的特征向量

	精确解	Languerre 迭代分治算法[5]	牛顿迭代分治算法[5]	本文算法
特征值	13.322 794 47	13.322 793	13.322 793	13.322 794 473 440 10 −0.000 000 000 000 00i
	4.223 060 030	4.223 060	4.223 060	4.223 060 029 945 01 +0.000 000 000 000 00i
	7.227 072 748 + 0.803 818 890 3i	7.227 073 + 0.807 819i	4.223 060	7.227 072 748 307 45 + 0.803 818 890 267 42i
	7.227 072 748 + 0.803 818 890 3i	7.227 073 + 0.807 819i	4.223 060	7.227 072 748 307 45 + 0.803 818 890 267 42i
特征向量	$\begin{pmatrix}-0.716542469\\ -0.6895225072\\ -0.1017511866\\ -0.02779026158\end{pmatrix}$	—	—	$\begin{pmatrix}-0.71654246901102\\ -0.68952240940285\\ -0.10175114779194\\ -0.02779027224297\end{pmatrix}$
	$\begin{pmatrix}-0.5969098319\\ -0.3306555246\\ -0.6974076342\\ 0.7849535101\end{pmatrix}$	—	—	$\begin{pmatrix}-0.59690983191003\\ -0.33065515791063\\ -0.69740709604496\\ 0.78495305031909\end{pmatrix}$

由表 2 可以看出牛顿迭代法只得到矩阵 ***A*** 的两个实特征值，遗漏了一对复特征值，Languerre 迭代法虽然求出了矩阵 ***A*** 的 4 个特征值，但精度较低，并且与精确解间的误差大于本文算法与精确解间的误差；本文算法所求的特征向量与精确解间的误差为 10^{-7}，精度非常高。

图 3 和图 4 分别为特征值及与实特征值相对应的特征向量的适应度函数值随迭代次数变化的曲线，可以看出所求解的精度高，收敛速度快。

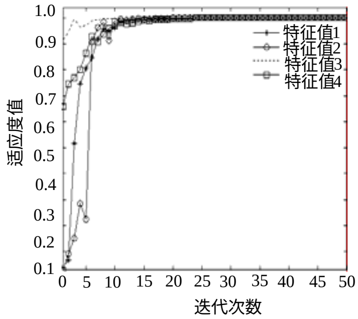

图 3　特征值对应的适应度函数变化曲线

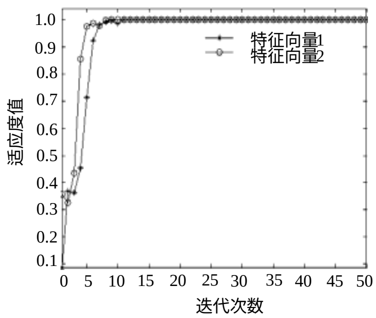

图 4　特征向量对应的适应度函数变化曲线

6　结束语

文中给出的进化策略算法可用于求任意实矩阵的特征值、特征向量，由算例可以看出该算法所求得的解，精度高、收敛速度快。对于含虚特征值的情形，由于 Newton 迭代法不收敛，因此不能求出矩阵的虚特征值，而本文算法能将 n 阶矩阵在复数域内的所有特征值求出，求解精度高于 Languerre 迭代法及其它一些算法；对于含重特征值的情形，该算法也是行之有效的。

参考文献

[1] Back T, Schwefel H P. Evolution Strategies I: Variants and Their Computational Implementation[M]. [S. l.]: Wiley, 1995.

[2] Schwefel H P, Back T. Evolution Strategies II: Theoretical Aspects[M]. [S. l.]: Wiley, 1995.

[3] Mathews J H, Fink K D. Numerical Methods Using MATLAB[M]. 4th ed. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2005.

[4] 杨廷俊. 矩阵特征值与特征向量的同步求解[J]. 甘肃联合大学学报, 2006, 20(3): 100-103.

[5] 罗晓广，李晓梅. 解非对称矩阵特征值问题的一种并行分治算法[J]. 高等学校计算数学学报, 1999, 21(2): 140-149.