特征值问题的高效算法研究及其应用

报告人：庞宏奎

数学研究院 & 数学与统计学院

2023年2月26日

一、重点研究内容

选聘研究方向： 量子力学的谱算法、经济优化理论、非时齐马氏过程、随机微分方程、随机动力系统等研究方向.

进数学研究院之后的重点研究内容： 大规模特征值问题的高效算法研究及其应用,

$$AX = X\Lambda.$$

求解特征值方面的专著：

- B. Parlett, *The Symmetric Eigenvalue Problem*, 1998, SIAM Pub..
- Z. Bai, et al., *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems-A Practical Guide*, 2000, SIAM Pub..
- G. Stewart, *Matrix Algorithms Volume II: Eigensystems*, 2001, SIAM Pub..
- Y. Saad, *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*, 2011, SIAM Pub..

一、重点研究内容

根据问题的性质可分：Hermitian 特征值问题; Non-Hermitian 特征值问题; Hermitizable 特征值问题；广义特征值问题；非线性特征值问题；张量特征值问题等.

根据实际问题的需求：计算全部特征值及相应的特征向量；若干最大的（最小的）特征值及相应的特征向量；若干内部特征值及相应的特征向量；某个区间（区域）上的特征值及相应的特征向量等。

已有的主要算法：QR算法；幂法（Power method）；反幂法（Inverse power method）；Krylov子空间方法（包括Lanczos method; Arnoldi method 等）; Jacobi-Davidson方法；...

MATLAB软件中计算特征值的函数：eig (计算全部特征值); eigs (计算部分特征值)

二、研究内容的背景、已有的研究基础、研究意义

研究内容背景：

经济最优化理论，产品排序需要计算消耗系数矩阵的最大特征值及相应的特征向量[1]；网页排序（PageRank）；

计算化学，线性缩放的密度泛函理论（linear-scaling density functional theory）和完全组态相互作用（full configuration interaction）问题中需要计算基态和低激发态(the ground-state and low-lying excited states)相应的若干最小特征值及特征向量[2]；（由于计算量的限制不能做正交化，特征向量为稀疏的）

统计学、图像恢复等领域中涉及的（稀疏）主成分分析（PCA）需要计算若干最大特征值及相应的特征向量[3]；

降维；谱聚类（spectral clustering）；$\cdots$ $\cdots$ 都会涉及到计算端部特征值问题；

[1] 陈木法，华罗庚经济最优化理论的新进展，应用概率统计，2022

[2] Gao, Li, Lu, Triangularized orthogonalization-free method for solving extreme eigenvalue problems, JSC, 2022.

[3] V. Kuleshov, Fast algorithms for sparse PCA based on Rayleigh quotient iteration, JMLR, 2013

已有的研究基础：

之前的研究工作主要集中在大规模结构线性系统的快速求解，特别是预处理迭代解法，

$$Ax = b.$$

问题主要来源：数值求解各类微（积）分方程和分数阶微分方程离散所得的大型结构线性系统，如Toeplitz-like线性系统，分层低秩结构线性系统等；

此外，研究过Toeplitz矩阵指数函数 $\exp(A)v$ 的快速算法，快速围道积分算法等。

已有的研究基础：

关于特征值的计算方面始于：

- M. Chen, Z. Jia, H. Pang, Computing top eigenpairs of Hermitizable matrix, Front. Math. China, 2021.

Hermitizable matrix $\longrightarrow$ Hermitian matrix $\xrightarrow[\mathcal{O}(n^3)]{Householder\ \ transform}$ Tridiagonal matrix $\longrightarrow$ Fast solver.

2022年陈先生发表论文：

M. Chen, R. Chen, Top eigenpairs of large scale matrices, CSIAM, 2022[4].

（估计谱半径作位移$\longrightarrow$）幂法（PI）$\longrightarrow$变位移反幂法（IPI$_v$）$\longrightarrow$固定位移反幂法（IPI$_f$）

[4] 基于两个局部估计技术（localized estimation techniques），将幂法和位移反幂法的优点结合在一起给出了一类高精度有效的计算前若干最大特征值对的算法。

已有的研究基础：

关于特征值的计算方面始于：

• M. Chen, Z. Jia, H. Pang, Computing top eigenpairs of Hermitizable matrix, Front. Math. China, 2021.

Hermitizable matrix $\longrightarrow$ Hermitian matrix $\xrightarrow[\mathcal{O}(n^3)]{\textit{Householder transform}}$ Tridiagonal matrix $\longrightarrow$ Fast solver.

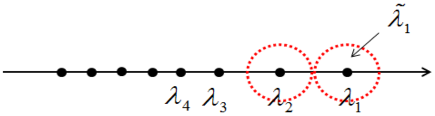
2022年陈先生发表论文：

M. Chen, R. Chen, Top eigenpairs of large scale matrices, CSIAM, 2022[4].

（估计谱半径作位移$\longrightarrow$）幂法（PI）$\longrightarrow$变位移反幂法（IPI$_v$）$\longrightarrow$固定位移反幂法（IPI$_f$）

[4]基于两个局部估计技术（localized estimation techniques），将幂法和位移反幂法的优点结合在一起给出了一类高精度有效的计算前若干最大特征值对的算法。

已有的研究基础： 我们的思考1，幂法转为位移反幂法的自适应准则，



给定幂法的初始停机准则$\varepsilon > 0$，用幂法计算$\hat{\lambda}_1$和$\hat{\lambda}_2$。定义

$$\delta = \left| \frac{\hat{\lambda}_1 - \hat{\lambda}_2}{2\hat{\lambda}_1} \right| .$$

如果$\delta < \varepsilon$，则缩小$\varepsilon := 10^{-1} * \varepsilon$，重复上述过程，直到$\delta > \varepsilon$为止。然后幂法转为反幂法。

Table 1: Computing top 6 eigenvalues by the adaptive technique. (R) n=5000

λ	Z-PI	iter-PI	tol-PI	tol-PI-final
1st	5021.9182380	18545/28417	0.5	0.005
2nd	4999.0399259	49527/24079	0.5	0.00005
3rd	4998.1382745	25/25	0.5	0.00005
4th	4997.0779147	25/21771	0.5	0.00005
5th	4996.1576651	25/20445	0.5	0.00005
6th	4995.1030324	25/10797	0.5	0.00005

二、研究内容的背景、已有的研究基础、研究意义

λ	Z-IPI$_v$	iter-IPI$_v$	tol-IPI$_v$
1st	5000.000000000000	10	1e-6
2nd	4999.000002171369	2	1e-6
3rd	4998.000217675986	2	1e-6
4th	4997.000026643257	2	1e-6
5th	4996.000343122708	2	1e-6
6th	4995.000076092531	2	1e-6
λ	Z-IPI$_f$	iter-IPI$_f$	tol-IPI$_f$
1st	5000.000000000000	1	1e-12
2nd	4999.000000001161	2	1e-12
3rd	4998.000000007544	3	1e-12
4th	4997.000000008056	2	1e-12
5th	4996.000000001573	3	1e-12
6th	4995.000000004986	3	1e-12

思考2，由于特征值之间间隙越大或者说$\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$越小，幂法的收敛速度越快，能否对矩阵做某种变换使得其特征值分布更加分散同时使矩阵与向量的乘积容易计算。（如指数函数e^A，多项式，或者？？）

思考3，根据实际问题矩阵的来源挖掘矩阵的结构和性质，若具有特殊的结构和性质可以依此对位移求逆过程中的带位移线性系统设计快速算法，以降低计算量。（这需要了解问题的背景来源）

另外，我们已将陈先生的算法应用在图像重构问题中，能否将相应算法应用于计算化学领域需要跟相关专家交流了解其问题背景、矩阵来源等。

二、研究内容的背景、已有的研究基础、研究意义

思考2，由于特征值之间间隙越大或者说$\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$越小，幂法的收敛速度越快，能否对矩阵做某种变换使得其特征值分布更加分散同时使矩阵与向量的乘积容易计算。（如指数函数e^A，多项式，或者？？）

思考3，根据实际问题矩阵的来源挖掘矩阵的结构和性质，若具有特殊的结构和性质可以依此对位移求逆过程中的带位移线性系统设计快速算法，以降低计算量。（这需要了解问题的背景来源）

另外，我们已将陈先生的算法应用在图像重构问题中，能否将相应算法应用于计算化学领域需要跟相关专家交流了解其问题背景、矩阵来源等。

二、研究内容的背景、已有的研究基础、研究意义

思考2，由于特征值之间间隙越大或者说$\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$越小，幂法的收敛速度越快，能否对矩阵做某种变换使得其特征值分布更加分散同时使矩阵与向量的乘积容易计算。（如指数函数e^A，多项式，或者？？）

思考3，根据实际问题矩阵的来源挖掘矩阵的结构和性质，若具有特殊的结构和性质可以依此对位移求逆过程中的带位移线性系统设计快速算法，以降低计算量。（这需要了解问题的背景来源）

另外，我们已将陈先生的算法应用在图像重构问题中，能否将相应算法应用于计算化学领域需要跟相关专家交流了解其问题背景、矩阵来源等。

二、研究内容的背景、已有的研究基础、研究意义

- Gao, Li, Lu, Triangularized orthogonalization-free method for solving extreme eigenvalue problems, JSC, 2022；

- Gao, Li, Lu, Global convergence of triangularized orthogonalization-free method, CMS, 2023.

求解若干最大（最小）特征值问题可转化为如下最优化问题，上述文献基于梯度下降法设计了不需要正交化和求逆的算法。

p个最小特征值问题 $\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} \|A + XX^\intercal\|_F^2$, 其中$A = A^\intercal$, A有q个负特征值, $p < q$.

p个最大特征值问题 $\min_{X\in\mathbb{R}^{n\times p}} tr\left(\left(2I - X^\intercal X\right) X^\intercal AX\right)$, 其中$A$为对称负定矩阵.

（这里需要$(X^\intercal X)^{-1} \approx 2I - X^\intercal X$.）

问题：能否将陈先生算法的思想和技术应用于求解上述优化问题？

三、可能会用到的学科知识

- 矩阵理论、矩阵计算方面的知识；
- 生灭过程、Markov链等相关的概率知识；
- 需了解具体问题的相关背景知识（如计算化学，经济最优化等）；
- 编程方面的知识，若面对超大规模问题可能需要并行算法和编程方面的知识。

四、研究过程中可能会面临的难点与困难

- 关于问题的来源和背景需与相关领域的专家交流讨论，了解他们研究中遇到的计算困难。
- 目前想法还不成熟，还没找到好的突破口，没有比较好的想法；
- 理论分析，算法的收敛性，稳定性、精度等方面的分析是研究过程中可能会面临的难点；

五、需要与哪些领域的研究人员合作

- 本领域、概率统计领域等研究人员；
- 应用领域的相关研究人员，如图像处理、计算化学、经济部门等

六、对研究院与学科的发展有什么样的帮助

- 促进量子力学谱算法的研究和发展；所得算法可为经济最优化方面的研究提供算法支撑；
- 希望能有好的研究成果，支撑相关学科的发展。

其他建议

暂时无。

请各位老师批评指正!