高级数值分析期中作业报告

22 级计算 2 班 09210629 魏文杰
wei09210629@163.com

2024 年 10 月 27 日

1 Question 1

设矩阵 A 为 100 维三对角矩阵, 主对角线为 2, 两个次对角线为 -1,

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}_{100\times 100}$$

计算矩阵 A 的三个最小特征值.

解: 采用经典 Arnoldi 算法求解. 为求出最小的 3 个特征值, 利用反幂法的思想, 只需对 A^{-1} 进行 Arnoldi 正交分解.

注意到在原始的 Arnoldi 正交分解算法中, 只有在计算 $w = A * q$ 时使用了 A 本身和列向量相乘, 为避免直接求逆, 只需将这一步改为 $w = A \backslash q$, 其余部分不变.

Listing 1: **ArnoldiIteration_inv.m**

```
function [Q, H] = ArnoldiIteration_inv(A, q1, k)
    q1 = q1 / norm(q1);
    n = size(A, 1);
    Q = zeros(n, k + 1);
    H = zeros(k + 1, k);
    Q(:, 1) = q1;
    for i = 1 : k
        w = A \ Q(:, i);  % 欲求最小特征值, 采用反幂法
        for j = 1 : i
            H(j, i) = w' * Q(:, j);
            w = w - H(j, i) * Q(:, j);
        end
        H(i + 1, i) = norm(w);
        if H(i + 1, i) == 0
            disp('正交化无法继续');
```

```
            break;
        else
            Q(:, i + 1) = w / H(i + 1, i);
        end
    end
end
```

在求解 Ritz 向量前, 还需要求出矩阵特征值所对应的特征向量. 假设基本 QR 方法迭代至收敛, 设

$$Q = Q_1 Q_2 \cdots Q_k,$$

则基本 QR 方法迭代矩阵为

$$R = Q^T A Q,$$

其中 $R = A_{k+1}$ 为上三角矩阵. 若 (λ, v) 是 R 的特征对, 即 $Rv = \lambda v$, 则有

$$AQv = QRv = \lambda Qv,$$

即 (λ, Qv) 为 A 的特征对. 因此只需求上三角矩阵 R 的特征对即可得到 A 的特征对. 利用求特征值均为单重的上三角矩阵的特征向量的方法, 可以求出对应特征值的特征向量, 从而计算 Ritz 向量.

Listing 2: **BasicQR.m**

```
function [V, Lambda] = BasicQR(A, epsilon)
    k = 0;
    Ak = A;
    Q = eye(size(A, 1));
    while norm(Ak - triu(Ak)) > epsilon
        k = k + 1;
        [Qk, Rk] = qr(Ak);
        Q = Q * Qk;
        Ak = Rk * Qk; % 计算基本 QR 方法的迭代矩阵
    end
    n = size(Ak, 1);
    Vk = zeros(n);
    Lambda = diag(Ak);
    % 接下来考虑求出特征向量, 为后续算 Ritz 向量做准备
    for i = n : -1 : 1
        fi = Lambda(i) * eye(n) - Ak;
        for j = i : -1 : 1
            if j == i
                Vk(j, i) = 1;
            else
                temp = 0;
```

```
                for k = n : -1 : j + 1
                    temp = temp + fi(j, k) * Vk(k, i);
                end
                    Vk(j, i) = -temp / fi(j, j);
            end
        end
        Vk(:, i) = Vk(:, i) / norm(Vk(:, i));
    end
    V = Q * Vk;  % V 才是 A 对应特征向量组成的矩阵
end
```

接下来调用以上两个函数, 可以实现经典 Arnoldi 方法. 最后将得到的三个特征值取倒数即可得原矩阵 A 的 3 个最小特征值.

Listing 3: **ClassicalArnoldi_inv.m**

```
function [mu, U] = ClassicalArnoldi_inv(A, q, m)
    q = q / norm(q);
    eps = 1;
    k = m - 1;
    while eps > 1e-16
        k = k + 1;
        I = eye(k);
        ek = I(:, k);
        [Q, H] = ArnoldiIteration_inv(A, q, k);
        Hk = H(1 : k, :);
        [V, Lambda] = BasicQR(Hk, eps);
        Q = Q(:, 1 : k);
        U = Q * V;  % 计算 Ritz 向量
        for j = 1 : m
            eps = norm(H(k + 1, k)) * norm(ek' * V(:, j));
            if eps > 1e-16
                break;
            end
        end
    end
    mu = 1 ./ Lambda(1:3);  % 取倒数才是 A 本身对应的最小特征根
end
```

最后, 在实际运行过程中发现将初始向量 q 取为全 1 向量时效果较差, 而使用 rand 指令生成初始向量 q 后效果更好.

Listing 4: **question1.m**

```
format long
```

```
n = 100;
e = ones(n,1);
A = spdiags([-e 2*e -e], -1 : 1, n, n);  % 生成对应三对角稀疏矩阵
q = rand(n, 1);  % 这里使用 rand 来生成初始向量, 效果更好
m = 3;
[lambda, U] = ClassicalArnoldi_inv(A, q, m);
disp('A的3个最小特征值分别为:');
disp(lambda);
```

运行上述 MATLAB 程序, 可以得到结果: A 的 3 个**最小**特征值分别为

$$\lambda_1 = 0.000967435416024,$$
$$\lambda_2 = 0.003868805732811,$$
$$\lambda_3 = 0.008701304061963.$$

2 Question 2

考虑区间 $[-1,1]$ 上的常微分方程特征值问题

$$\begin{cases} -u''(x) + \cos(x)u(x) = \lambda u(x), \\ u(-1) = u(1) = 0. \end{cases} \tag{1}$$

其中 $\lambda \in \mathbb{R}$ 为特征值, $u(x) \neq 0$ 为特征函数. 求使方程 (1) 成立的 3 个最小特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ 的近似值.

解: 将 $[-1,1]$ 均分为 N 段, 得到分划 $-1 = x_1 < x_2 < \cdots < x_{N+1} = 1$, 其中 $x_i = -1 + \frac{2(i-1)}{N}$, $i = 1, 2, \cdots, N+1$.

记步长 $h = \frac{2}{N}$, 则 $x_{i+1} = x_i + h$, $i = 1, 2, \cdots, N$. 从而可记 $u(x_i) = u_i$, $i = 1, 2, \cdots, N+1$.

对于 $u''(x)$, 使用中心差分近似

$$u''(x) \approx \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2}.$$

从而方程 (1) 中第一个式子被离散化为

$$-\frac{1}{h^2}u_{i+1} + (cos x_i + \frac{2}{h^2} - \lambda)u_i - \frac{1}{h^2}u_{i-1} = 0, \quad i = 2, 3, \cdots, N.$$

利用边值条件 $u(-1) = u(x_1) = 0 = u(x_{N+1}) = u(1)$ 可知, 原问题等价于求使得齐次方程组

$$\begin{pmatrix} cos x_2 + \frac{2}{h^2} - \lambda & -\frac{1}{h^2} & & & \\ -\frac{1}{h^2} & cos x_3 + \frac{2}{h^2} - \lambda & -\frac{1}{h^2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\frac{1}{h^2} & cos x_{N-1} + \frac{2}{h^2} - \lambda & -\frac{1}{h^2} \\ & & & -\frac{1}{h^2} & cos x_N + \frac{2}{h^2} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

有非零解的 3 个最小 λ 值. 从而只需要让上述齐次方程组的系数矩阵奇异即可.

若记

$$
A = \begin{pmatrix}
cosx_2 + \frac{2}{h^2} & -\frac{1}{h^2} & & & \\
-\frac{1}{h^2} & cosx_3 + \frac{2}{h^2} & -\frac{1}{h^2} & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & -\frac{1}{h^2} & cosx_{N-1} + \frac{2}{h^2} & -\frac{1}{h^2} \\
 & & & -\frac{1}{h^2} & cosx_N + \frac{2}{h^2}
\end{pmatrix},
$$

则原问题又等价为求使得 $\det(A - \lambda I) = 0$ 的 3 个最小 λ 值. 这表明只需求出 A 的 3 个最小特征根, 从而化归为第一题的类型. 故在下述代码 question2.m 中再次调用第一题中的函数 (ClassicalArnoldi_inv.m, ArnoldiIteration_inv.m, BasicQR.m) 即可求解.

Listing 5: **question2.m**

```
format long
N = 10000;  % 本题中步长的选取会影响结果的精确性
% 为保证结果达到所需精度, 可以不断增大步长
% 直至所需精度位数前的数字不再改变
h = 2 / N;  % 确定步长
e = ones(N - 1, 1);
x = zeros(N + 1, 1);
for i = 1 : N + 1
    x(i) = -1 + 2 * (i - 1) / N;
end

A = spdiags([-1/(h^2)*e 2/(h^2)*e -1/(h^2)*e], -1:1, N-1, N-1);

for i = 2 : N
    A(i-1, i-1) = A(i-1, i-1) + cos(x(i));
end

q = rand(N-1, 1);
m = 3;
[lambda, U] = ClassicalArnoldi_inv(A, q, m);  % 反幂法求解最小特征值
disp('最小的3个特征值分别为:');
disp(lambda);
```

运行上述 MATLAB 程序, 可以得到结果: A 的 3 个**最小**特征值分别为

$$\lambda_1 = 3.403469341015978,$$

$$\lambda_2 = 10.732694014691958,$$

$$\lambda_3 = 23.057724823186632.$$