

高等数值分析第二次实验作业

李伟伟 2019312462

清华大学核能与新能源技术学院 核博 191

(注意：矩阵规模不得小于 1000 阶)

1. 构造例子特征值全部在右半平面时，观察基本的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法的数值性态和相应的重新启动算法的收敛性

解：

(1) 构造特征值全部在右半平面的系数矩阵 A

首先构造如下矩阵 $U \in R^{2n \times 2n}$ ，U 矩阵由 n 个对角分块矩阵组成，每个分块矩阵 u_{ii} 具有以下形式

$$u_{ii} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}$$
$$U = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & & & & \\ 1 & 1 & & & & & & & \\ & & 2 & -2 & & & & & \\ & & 2 & 2 & \ddots & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & & & n/2 & -n/2 & & \\ & & & & & n/2 & n/2 & & \end{pmatrix}$$

然后取任意一单位正交阵 Q, 使得

$$A = Q^T U Q$$

矩阵 U 的特征值为一系列复共轭 $\alpha \pm i\beta$ 构成，均分布在右半平面。矩阵 A 与矩阵 U 具有相同的特征值，矩阵 A 构造完毕。实现代码如下：

```
1 n=500;
2 Q=orth(rand(2*n,2*n));
3 for j=1:n
4 U(2*j-1,2*j-1)=j;
5 U(2*j-1,2*j)=-j;
6 U(2*j,2*j)=j;
7 U(2*j,2*j-1)=j;
8 end
9 A=Q'*U*Q;
```

(2) 观察基本的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法的数值性态（收敛准则： $\epsilon = 10^{-6}$ ）

```

1  clc;clear;close;
2  n=500;
3  m=1000;
4  Q=orth(rand(2*n,2*n));
5  for j=1:n
6  U(2*j-1,2*j-1)=j;
7  U(2*j-1,2*j)=-j;
8  U(2*j,2*j)=j;
9  U(2*j,2*j-1)=j;
10 end
11 A=Q'*U*Q;
12 b=ones(2*n,1);
13 x_0=zeros(2*n,1);
14 tic
15 [ r1 ] = Arnoldi( A,x_0,b,m );
16 [ r2 ] = GMRES( A,x_0,b,m );
17 toc
18 semilogy(r1,'b')
19 hold on
20 semilogy(r2,'r')

```

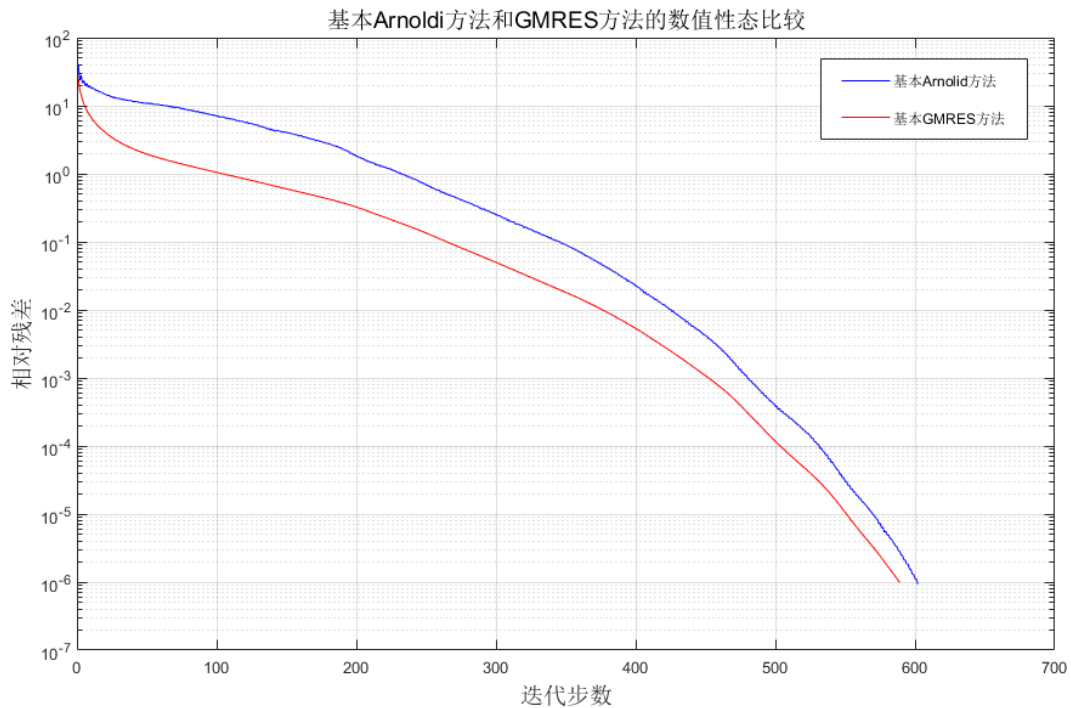


图 1: 基本 Arnoldi 方法和 GMRES 方法数值性态比较

方法	迭代步数	计算时间/s
基本 Arnoldi	602	2.70
基本 GMRES	588	4.97

表 1: 基本的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法数值性态比较

结果讨论:

① 迭代步数: 停机准则设置为 $\epsilon = 10^{-6}$; 达到停机准则, 基本 Arnoldi 方法需要 602 步, 基本 GMRES 需要 588 步, 基本 GMRES 方法的收敛速度要快于 Arnoldi 方法。因为 GMRES 方法 $\|r_m\|$ 相比于 Arnoldi 有最优性质。

② 计算时间: 达到停机准则, 基本的 Arnoldi 方法需要 2.70s, 基本 GMRES 方法需要 4.97s, 基本 GMRES 方法的计算时间要长于 Arnoldi 方法。因为 GMRES 方法中每一次迭代都需要计算一次最小二乘问题 $\min_{y \in R^m} \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$

(3) 观察重新启动的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法的收敛性 (收敛准则: $\epsilon = 10^{-6}$)

```

1  clc;clear;close;
2  n=500;
3  %m取 10, 50, 100, 200
4  m=50;
5  Q=orth(rand(2*n,2*n));
6  for j=1:n
7  U(2*j-1,2*j-1)=j;
8  U(2*j-1,2*j)=-j;
9  U(2*j,2*j)=j;
10 U(2*j,2*j-1)=j;
11 end
12 A=Q'*U*Q;
13 b=ones(2*n,1);
14 x_0=zeros(2*n,1);
15 tic
16 [ r1 ] = GMRES_r( A,x_0,b,m );
17 [ r2 ] = Arnoldi_r( A,x_0,b,m );
18 toc
19 semilogy(r1,'b')
20 hold on
21 semilogy(r2,'r')
```

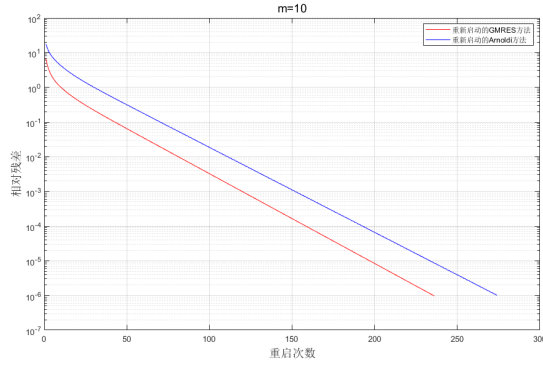
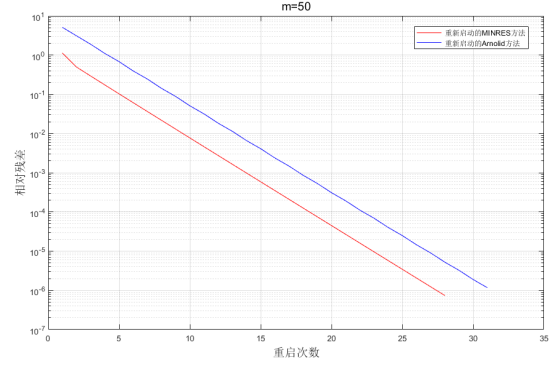
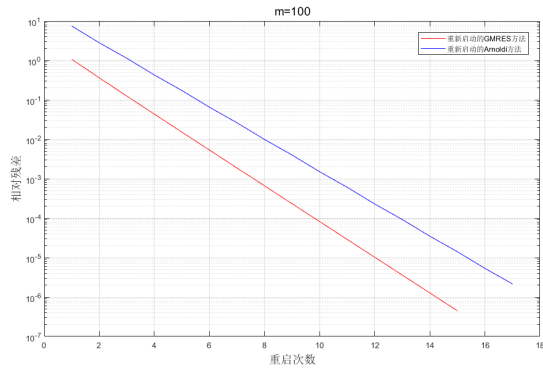
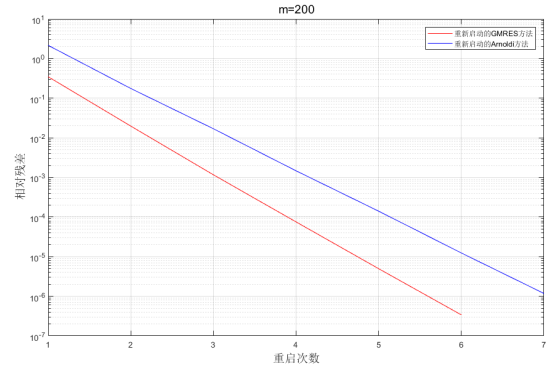
(a) $m=10$ (b) $m=50$ (c) $m=100$ (d) $m=200$

图 2: 重新启动的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法收敛性比较

重启步长	重启次数	计算时间/s
10	279	0.83
50	33	0.75
100	18	1.32
200	7	1.57

表 2: 重启的 Arnoldi 方法

重启步长	重启次数	计算时间/s
10	240	0.71
50	29	0.62
100	15	0.88
200	6	1.09

表 3: 重启的 GMRES 方法

结果讨论:

① 重启次数: 停机准则设置为 $\epsilon = 10^{-6}$; 达到停机准则, 随着重启步长 m 的增加, 基本 Arnoldi 方法和 GMRES 方法的重启次数都在减少, 但是当 m 增长到 50 左右的时候, 重启次数就减少地很缓慢。

② 重启算法的总迭代次数 (重启步长 \times 重启次数): 重启后的总迭代次数要大于基本方法的迭代次数, 因为每次重启后会丢失之前的计算信息, 从新的初值 x_0 开始计算。

③ 计算时间: 重启的 Arnoldi 和 GMRES 方法的计算时间都远远小于基本的方法, 对于同一个方程组问题, 重启的 GMRES 方法的收敛速度要优于重启的 Arnoldi。

2. 对于 1 中的矩阵, 将特征值进行平移, 使得实部有正有负, 和 1 的结果进行比较, 方法的收敛速度会如何? 基本的 Arnoldi 算法有无峰点? 若有, 基本的 GMRES 算法相应地会怎样?

解:

(1) 构造特征值实部有正有负的系数矩阵 A

对题目 1 中的矩阵 U 进行改造, 使其特征值实部有正有负, 每个分块矩阵 u_{ii} 依然具有以下形式

$$u_{ii} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 1-(k+1/2) & -1+(k+1/2) & & & & & & & \\ 1-(k+1/2) & 1-(k+1/2) & & & & & & & \\ & & 2-(k+1/2) & -2+(k+1/2) & & & & & \\ & & 2-(k+1/2) & 2-(k+1/2) & & & & & \\ & & & & \ddots & & & & \\ & & & & & k-(k+1/2) & -k+(k+1/2) & & \\ & & & & & k-(k+1/2) & k-(k+1/2) & & \\ & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & n-(k+1/2) & -n+(k+1/2) \\ & & & & & & & & n-(k+1/2) & n-(k+1/2) \end{pmatrix}$$

实现代码如下:

```
1 %k表示特征值实部为负的个数, k取1 10 50 100 200 500 900 950
2 s=k+1/2;
3 for j=1:n
4 U(2*j-1,2*j-1)=-s+j;
5 U(2*j-1,2*j)=s-j;
6 U(2*j,2*j)=-s+j;
7 U(2*j,2*j-1)=-s+j;
8 end
9 A=Q'*U*Q;
```

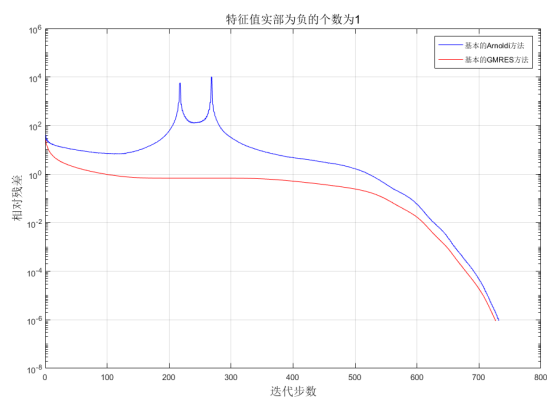
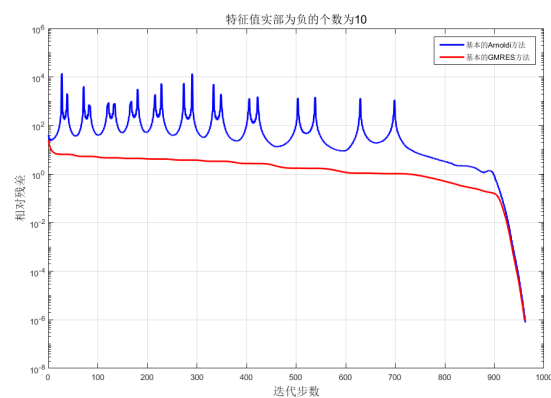
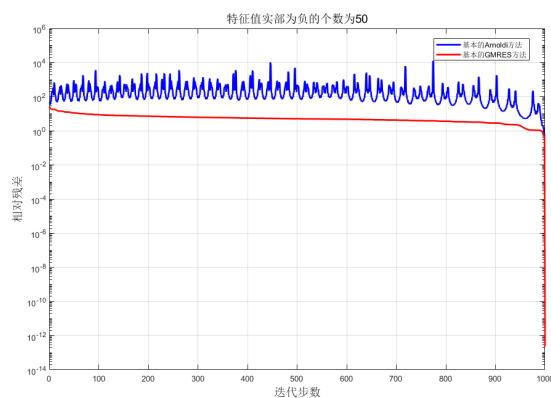
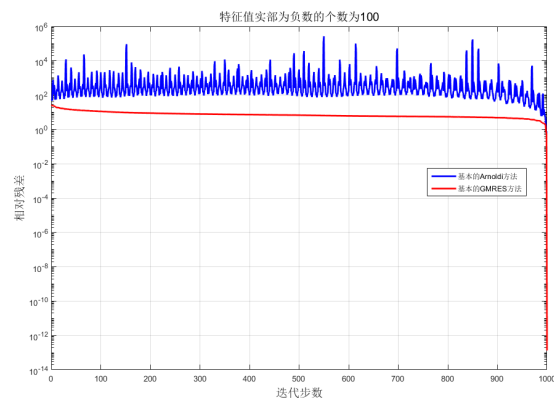
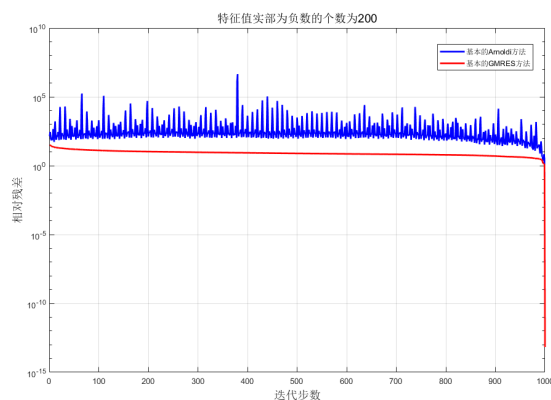
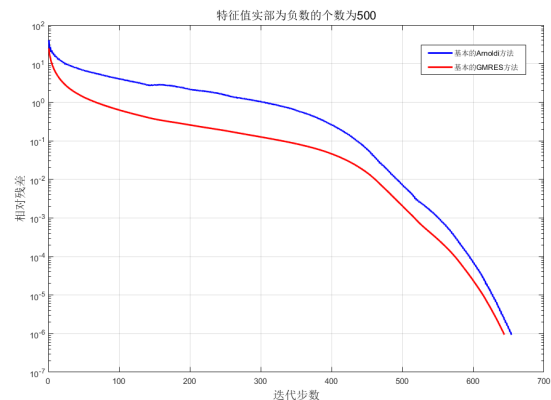
(2) 观察特征值实部为负数的个数不同时, 基本的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法的收敛性 (收敛准则: $\epsilon = 10^{-6}$)

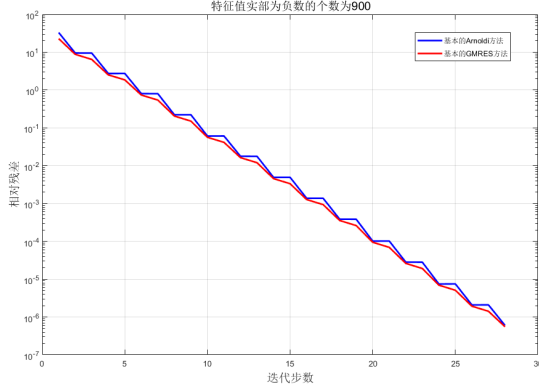
```
1 clc;clear;close;
2 n=500;
3 m=1000;
4 Q=orth(rand(2*n,2*n));
5 %k表示特征值实部为负的个数, k取1 10 50 100 200 500 900 950
6 k=200;
7 s=k+1/2;
8 for j=1:n
9 U(2*j-1,2*j-1)=-s+j;
10 U(2*j-1,2*j)=s-j;
11 U(2*j,2*j)=-s+j;
12 U(2*j,2*j-1)=-s+j;
13 end
14 A=Q'*U*Q;
15 b=ones(2*n,1);
16 x_0=zeros(2*n,1);
17 [ r1 ] = Arnoldi( A,x_0,b,m );
18 [ r2 ] = GMRES( A,x_0,b,m );
```

```

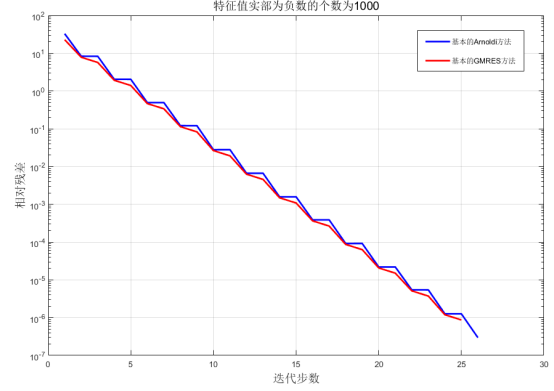
19 semilogy(r1,'b')
20 hold on
21 semilogy(r2,'r')

```

(a) $k=1$ (b) $k=10$ (c) $k=50$ (d) $k=100$ (e) $k=200$ (f) $k=500$



(g) k=900



(h) k=1000

图 3: 基本的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法在特征值实部为负数个数不同条件下的收敛性

k	迭代步数	计算时间/s
1	734	4.64
10	962	9.13
50	1000	10.99
100	1000	10.52
200	1000	10.62
500	654	3.35
900	28	0.02
1000	26	0.01

表 4: 基本的 Arnoldi 方法

k	迭代步数	计算时间/s
1	728	8.69
10	961	19.79
50	1000	25.26
100	1000	23.02
200	1000	26.06
500	644	5.97
900	28	0.01
1000	25	0.02

表 5: 基本的 GMRES 方法

结果讨论:

① 基本的 Arnoldi 算法有峰点, 因为基本的 Arnoldi 算法中计算 $y_m = \beta H_m^{-1} e_1$ 时, H_m 矩阵可能会近似奇异, 导致中断。而基本的 GMRES 算法光滑, 无峰点, 因为 GMRES 算法的残差具有最优性, 不中断。

② k 较小时, 基本的 Arnoldi 方法中出现的峰点个数随着 k 的增大而增加, 但是当 k 增大到 500 时, 之后的峰点个数会随着 k 的增加而迅速减少

③ 特征值实部为负数的个数远大于正数时, 相比于第一题, 基本的 Arnoldi 算法和基本的 GMRES 算法收敛速度会明显提升, 迭代步数明显减少。

3. 对 1 中的例子固定特征值的实部, 变化虚部, 比较收敛性.

解:

(1) 对 1 中的矩阵进行变化, 固定特征值的实部, 对虚部放大或缩小, 缩放系数为 k

对题目 1 中的矩阵 U 进行改造, 使其特征值虚部放大或缩小, 每个分块矩阵 u_{ii} 依然具有以下形式

$$u_{ii} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{pmatrix}$$

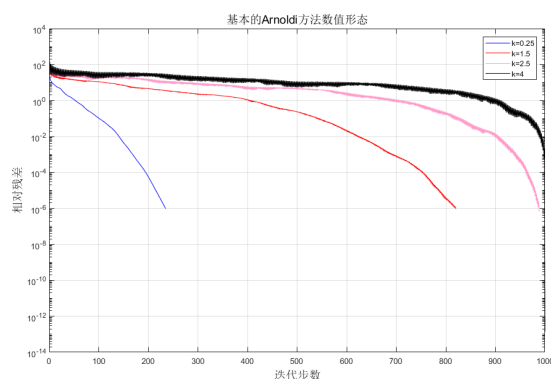
$$U = \begin{pmatrix} 1 & -k & & & & \\ k & k & & & & \\ & & 2 & -2k & & \\ & & 2k & 2 & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & n/2 & -n \cdot k/2 \\ & & & & & n \cdot k/2 & n/2 \end{pmatrix}$$

实现代码如下：

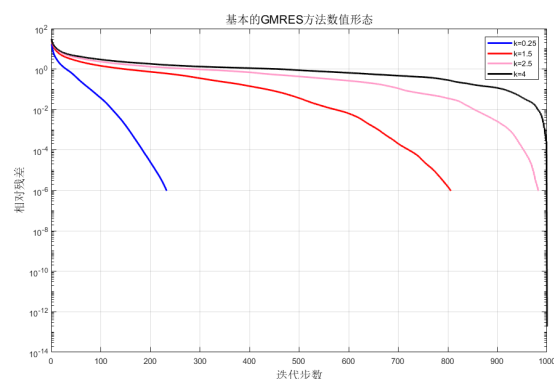
```

1  clc;clear;close;
2  %k表示缩放系数，k取0.25,1.5,2.5,4
3  k=0.25;
4  n=500;
5  m=1000;
6  Q=orth(rand(2*n,2*n));
7  for j=1:n
8      U(2*j-1,2*j-1)=j;
9      U(2*j-1,2*j)=-j*k;
10     U(2*j,2*j)=j;
11     U(2*j,2*j-1)=j*k;
12 end
13 A=Q'*U*Q;
```

(2) 观察基本的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法的数值性态（收敛准则： $\epsilon = 10^{-6}$ ）



(a) 基本的 Arnoldi 方法



(b) 基本的 GMRES 方法

图 4: 基本的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法在虚部缩放系数不同时的收敛性比较

虚部缩放系数	迭代步数	计算时间/s
0.25	238	0.31
1.5	816	5.98
2.5	986	9.98
4	1000	10.30

表 6: 基本的 Arnoldi 方法

虚部缩放系数	迭代步数	计算时间/s
0.25	231	0.47
1.5	806	12.12
2.5	986	22.25
4	1000	22.96

表 7: 基本的 GMRES 方法

结果讨论:

① 随着特征值虚部放大系数增加的时候, 基本的 Arnoldi 和 GMRES 算法收敛性都变差。迭代步数增大, 收敛速度变慢, 但是依然能够收敛到停机准则。

② 基本 GMRES 算法的迭代步数略小于 Arnoldi 算法, 但是 GMRES 计算时长却远大于 Arnoldi 算法。

③ 随着虚部放大系数的增加, 基本 Arnoldi 算法出现的峰点个数增加, 因为近似中断的次数增加。而 GMRES 算法相对平缓下降, 因为不中断。

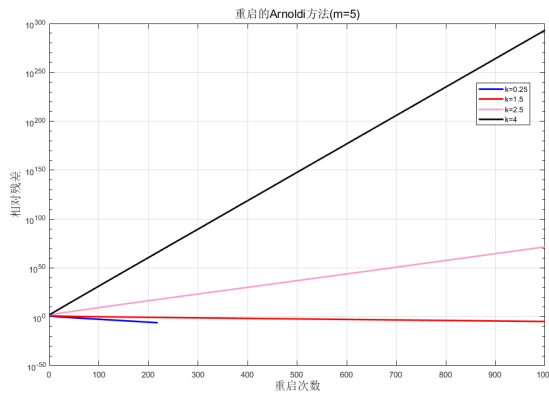
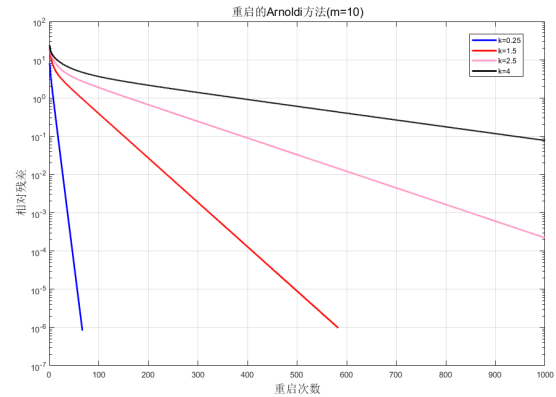
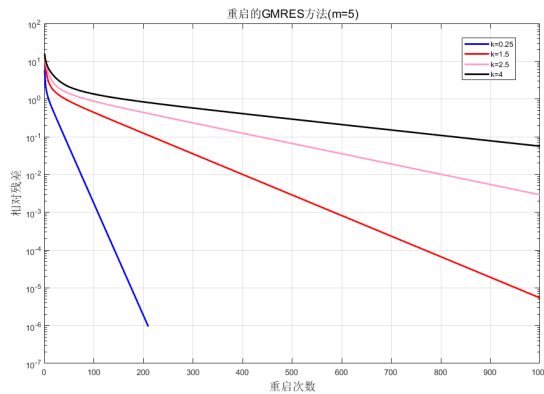
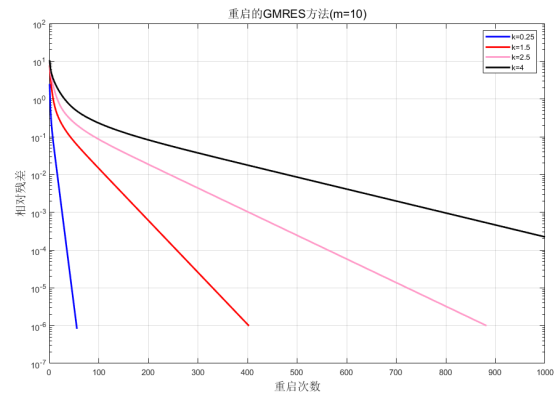
(a) $m=5$ 重启的 Arnoldi 方法(b) $m=10$ 重启的 Arnoldi 方法(c) $m=5$ 重启的 GMRES 方法(d) $m=10$ 重启的 GMRES 方法

图 5: 重启的 Arnoldi 方法和 GMRES 方法在虚部缩放系数不同时的收敛性比较

结果讨论：

① 随着特征值虚部放大系数增加的时候，基本的 Arnoldi 和 GMRES 算法收敛性都变差。迭代步数增大，收敛速度变慢。

② 当重启步长 m 较小，例如等于 5 时，重启的 Arnoldi 算法已经不收敛了，但是重启的 GMRES 算法依然收敛，因为 GMRES 算法的残差具有最优性。

③ 随着重启步长 m 增加，重启的 Arnoldi 和 GMRES 算法的收敛速度加快，迭代步数减少。

4. 当 A 只有 m 个不同特征值时，对于大的 m 和小的 m ，观察 Arnoldi 方法和 GMRES 方法的收敛性解：

(1) 首先构造只有 m 个不同特征值的矩阵 A ， $m=10,50,100,500,1000$

实现代码如下：

```
1  clc;clear;
2  n=1000;
3  %m=10,50,100,500,1000
4  m=50;
5  Q=orth(rand(n,n));
6  D=diag([repelem(10,n-m),linspace(15,1000,m)]);
7  A=Q*D*Q';
```

(2) 观察对于大的 m 和小的 m ，Arnoldi 方法和 GMRES 方法的收敛性

m	迭代步数	计算时间/s
10	11	0.016
50	35	0.024
100	45	0.029
500	58	0.041
1000	53	0.038

表 8: 基本的 Arnoldi 方法

m	迭代步数	计算时间/s
10	11	0.026
50	36	0.034
100	45	0.033
500	53	0.039
1000	52	0.037

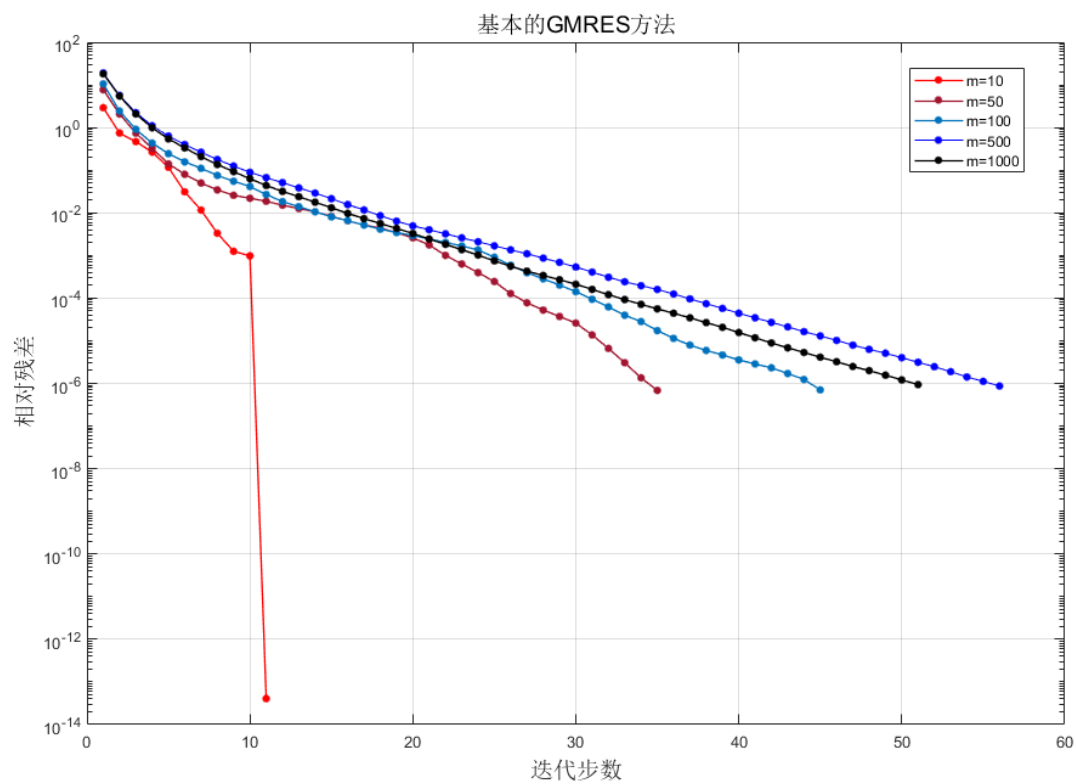
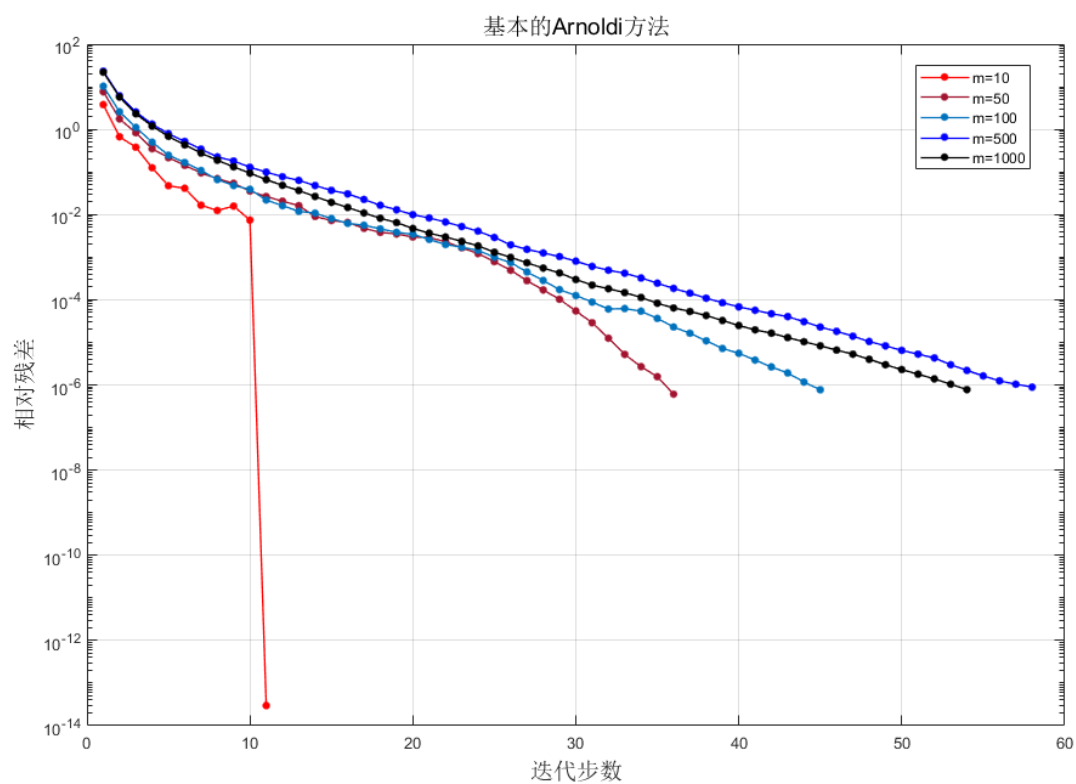
表 9: 基本的 GMRES 方法

结果讨论：

① 随着不同特征值数 m 的增加，基本的 Arnoldi 和 GMRES 算法的迭代步数增加，收敛速度变慢。两个算法的迭代步数和计算时间基本一致。

② 基本的 Arnoldi 和 GMRES 算法，都至多需要 m 步收敛。当 m 较小时，迭代步数接近 m ，但是当 m 较大时，迭代步数远小于 m 。

③ 此现象与 Lanczos 算法得到的结果类似。

图 6: 只有 m 个不同特征值问题的基本 Arnoldi 和 GMRES 方法收敛性

5. 取初始近似解为零向量，右端项 b 仅有 A 的 m 个不同个特征向量的线性组合表示时，Arnoldi 方法和 GMRES 方法的收敛性如何？

解：

(1) 首先构造只有 m 个不同特征向量线性组合的右端项 b ， $m=10,50,100,500,1000$

$$A = QUQ^T$$

实现代码如下：正交矩阵 Q 的每一列对应矩阵 A 的其中一个特征向量

```

1  clc;clear;close;
2  %构造1000阶每个特征值都不同的矩阵A
3  n=1000;
4  U=diag(linspace(1,n,n));
5  Q=orth(rand(n,n));
6  A=Q*U*Q';
7  %m取值为10, 50, 100, 500, 1000
8  m=10;
9  R=randperm(n);
10 %构造右端项b
11 b=zeros(n,1);
12 for j=1:m
13 b=b+Q(:,R(j));
14 end

```

m	迭代步数	计算时间/s
10	10	0.017
50	43	0.031
100	56	0.037
500	114	0.093
1000	169	0.178

表 10: 基本的 Arnoldi 方法

m	迭代步数	计算时间/s
10	10	0.014
50	41	0.030
100	59	0.044
500	145	0.181
1000	165	0.227

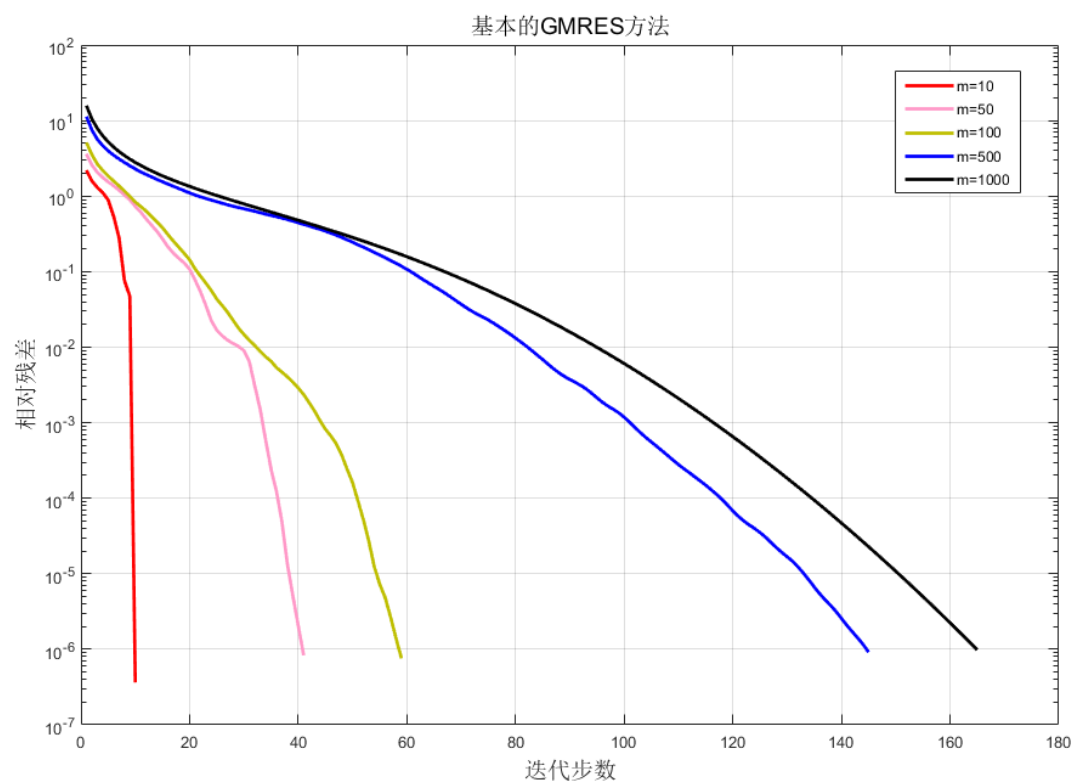
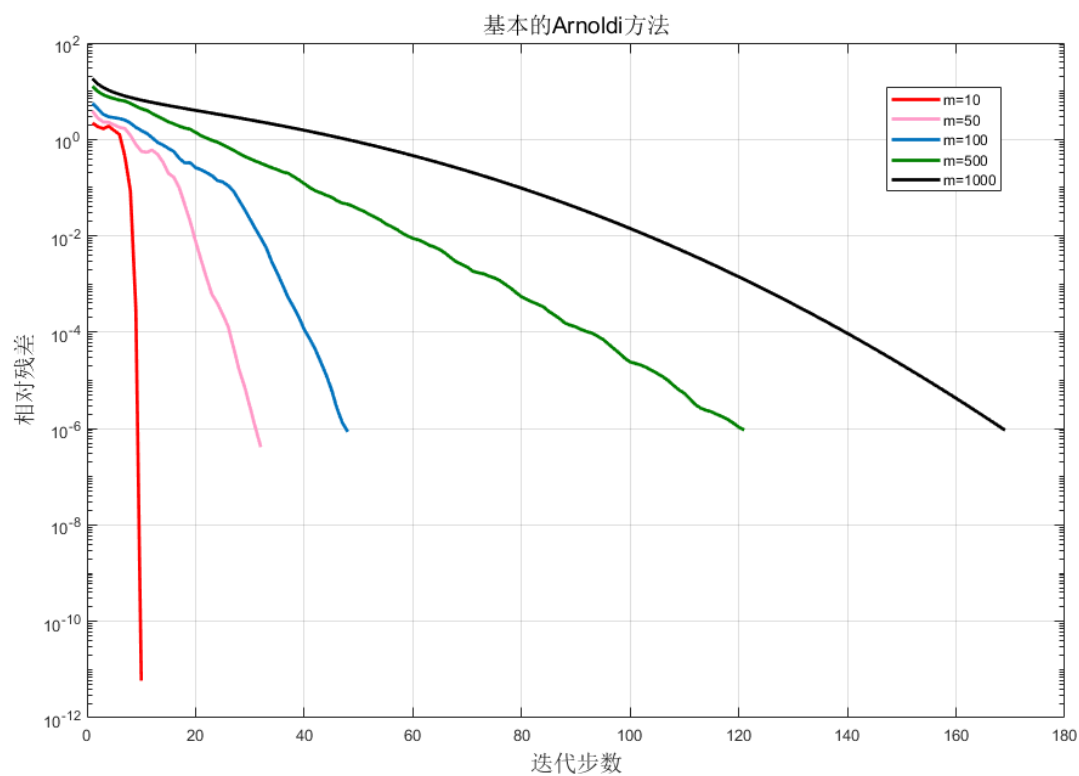
表 11: 基本的 GMRES 方法

结果讨论：

① 随着 m 的增大，基本的 Arnoldi 和 GMRES 算法的收敛速度均变慢，迭代步数增加。

② 基本 GMRES 算法的迭代步数略少于 Arnoldi 算法，计算时间略高于 Arnoldi 算法，符合算法的收敛性。

③ m 较小时，基本的 Arnoldi 算法出现了峰点，随着 m 增大，基本 Arnoldi 算法的峰点个数减少，逐渐平滑。基本 GMRES 算法根据性质，没有峰点出现。

图 7: 由 m 个不同特征值线性组合的 b 问题的基本 Arnoldi 和 GMRES 方法收敛性

附录

基本的 Arnoldi 算法

```
1 function [ r ] = Arnoldi( A,x_0,b,m )
2 r_0=b-A*x_0;
3 beta=norm(r_0);
4 v(:,1)=r_0/beta;
5 for j=1:m
6 w=A*v(:,j);
7 for i=1:j
8 h(i,j)=v(:,i)'\*w;
9 w=w-h(i,j)*v(:,i);
10 end
11 h(j+1,j)=norm(w);
12 v(:,j+1)=w/h(j+1,j);
13 y=h(1:j,1:j)\(beta*eye(j,1));
14 r(j)=h(j+1,j)*abs(y(end));
15 if r(j)<1e-6
16 break;
17 end
18 end
19 end
```

基本的 GMRES 算法

```
1 function [ r ] = GMRES( A,x_0,b,m )
2 r_0=b-A*x_0;
3 beta=norm(r_0);
4 v(:,1)=r_0/beta;
5 for j=1:m
6 w=A*v(:,j);
7 for i=1:j
8 h(i,j)=v(:,i)'\*w;
9 w=w-h(i,j)*v(:,i);
10 end
11 h(j+1,j)=norm(w);
12 v(:,j+1)=w/h(j+1,j);
13 [Q R]=qr(h);
14 g=Q'*(beta*eye(j+1,1));
15 r(j)=abs(g(end));
16 if r(j)<1e-6
17 break;
18 end
19 end
20 end
```

重启的 m 步 Arnoldi 算法

```

1 function [ r ] = Arnoldi_r( A,x_0,b,m )
2 for k=1:1000
3 r_0=b-A*x_0;
4 beta=norm(r_0);
5 v(:,1)=r_0/beta;
6 for j=1:m
7 w=A*v(:,j);
8 for i=1:j
9 h(i,j)=v(:,i) '*w;
10 w=w-h(i,j)*v(:,i);
11 end
12 h(j+1,j)=norm(w);
13 v(:,j+1)=w/h(j+1,j);
14 end
15 y=h(1:m,1:m)\(beta*eye(j,1));
16 r(k)=h(j+1,j)*abs(y(end));
17 if r(k)<1e-6
18 break;
19 else
20 x_0=x_0+v(:,1:m)*y;
21 end
22 end
23 end

```

重启的 m 步 GMRES 算法

```

1 function [ r ] = GMRES_r( A,x_0,b,m )
2 for k=1:1000
3 r_0=b-A*x_0;
4 beta=norm(r_0);
5 v(:,1)=r_0/beta;
6 for j=1:m
7 w=A*v(:,j);
8 for i=1:j
9 h(i,j)=v(:,i) '*w;
10 w=w-h(i,j)*v(:,i);
11 end
12 h(j+1,j)=norm(w);
13 v(:,j+1)=w/h(j+1,j);
14 end
15 [Q R]=qr(h);
16 g=Q*(beta*eye(m+1,1));
17 r(k)=abs(g(end));
18 if r(k)<1e-6
19 break;
20 else
21 x_0=x_0+v(:,1:m)*(R(1:m,1:m)\g(1:m,1));
22 end
23 end
24 end

```