数值分析第一次上机练习报告

——线性方程组解法

周懿-力 1 2021013053

一、 问题的描述

设 A 为以下形式的三对角矩阵(自己取适当阶数计算)

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

- (1) 用 Jacobi 方法计算其特征值;
- (2) 用 QR 算法计算其特征值.

对比一下两种方法 (要求达到三位有效数字).

二、 方法描述

(a) Jacobi 方法

A 是一个对称矩阵,这里为了提高扫描效率,我们使用 Jacobi 过关法:

设 $A^{(1)} = A$, 确定一个阈值 $\delta_1 > 0$, 取 m = 1, 精度为 $\varepsilon > 0$.

- 1. 扫描 A 的所有非对角元素 $a_{ij} (i \neq j)$, 如果 $|a_{ij}| > \delta_m$,则对矩阵 A 进行 Givens 相似变换,使得 $a_{ij} = a_{ji} = 0$.
- 2. 扫描结束后, 令 $\delta_{m+1} = \delta_m/n$, m = m + 1
- 3. 若 $\delta_m > \varepsilon$, 则停止迭代, 此时 $A^{(m)}$ 的对角线元素就是矩阵 A 的所有特征值.

我们根据上述算法编写程序,经过多次迭代就可以获得一个近似于上三角阵的 A 的相似矩阵,且其对角线恰为特征值。

(b)QR 方法

由题目要求我们可以知道,矩阵 A 是一个上 Hessenberg 矩阵,理论上已经证明,对于上 Hessenberg 矩阵,使用 QR 分解法迭代可以使得 A 收敛到与之相似的对角阵,算法如下:

- 1. 对 $A^{(k)}$ 进行 QR 分解: $A = Q_k R_k$
- 2. 交换位置相乘: $A^{k+1} = R_k Q_k$.
- 3. 扫描 $A^{(k+1)}$ 中的所有元素,如果有元素 $|a_{ij}| > \varepsilon$ 则继续迭代,否则输出 $A^{(k+1)}$ 的对角元素.

我们基于以上算法进行程序的编写,进行多轮迭代之后就可以得到一个近似于对角阵的 A 的相似矩阵。

三、 方案设计

我们通过编写 MATLAB 程序来进行线性方程组的求解。文件结构如下:

- 1. main.m: 主程序。该程序会生成题目要求的矩阵 A (阶数可随意调整),并且分别调用 eig_jacobi.m 和 eig_qr.m 求解 A 的特征值.
- 2. eig_jacobi.m: 使用 Jacobi 过关法求 A 的特征值的程序。该程序接受一个矩阵 A 及其阶数 n, 以及设置的精度 ε , 返回一个对角矩阵 Λ 作为 A 的特征值组成的对角阵。
- 3. $eig_qr.m$: 使用 QR 分解法求 A 的特征值的程序。该程序接受一个矩阵 A 及其阶数 n,以及设置的精度 ε ,返回一个对角矩阵 Λ 作为 A 的特征值组成的对角阵。
- 4. eig_invPow.m: 使用幂法 (反幂法) 求解 A 的特征值的程序。该程序接受一个矩阵 A 及 其阶数 n,以及设置的精度 ε ,返回一个浮点数 λ 作为 A 的最大特征值。如果求解其 他特征值,须先对矩阵运用平移技巧并求逆之后再输入。计算结果不计入表格,只作为 额外的实验。

四、 计算结果及其分析

为了更加直观的展示不同求解方法的误差,我们将求解之后得到的所有特征值从小到大重新排序,构成一个 n 维列向量 \mathbf{R} ,并且与 MATLAB 自带的 eig 函数求解的结果 (eig 函数的求解结果已经经过重排,得到一个 n 维列向量 \mathbf{R}_0) 进行对比。我们取残差 $\mathbf{r} = \mathbf{R} - \mathbf{R}_0$ 的模长作为求解的误差 e。同时,我们记录下每次使用两种求解方法的时间,所有的求解结果如下表 2所示。我们将求解时间和求解误差随矩阵阶数的变化绘成折线图,如图 1所示。从图 1我们可以看出,无论是从运行时间还是求解误差来看,QR 方法都占据绝对优势。从运行速度上看,Jacobi 方法每次循环都有接近 $O(n^2)$ 量级的乘法甚至是矩阵乘法的计算量(扫描到一个超过阈值的元素就要进行至少一次乘法和矩阵乘法运算),而 QR 每次循环只有两次矩

阵乘法的计算量。从求解误差上看, Jacobi 涉及到的矩阵运算量更大, 而且每一次的 Givens 旋转都存在误差传播的问题, 导致误差被放大。

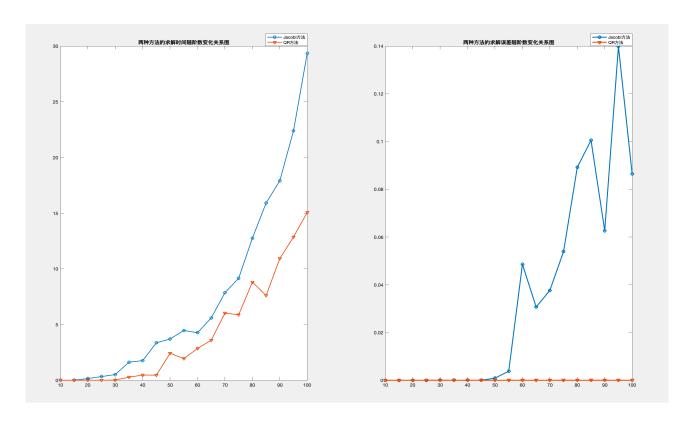


图 1: 求解时间(左)和误差(右)随阶数的变化关系图

我们还同时尝试了幂法求解矩阵的最大特征值。和精确结果对比之后我们发现,当我们的初始向量取为 (1,1,1,...1) 时,结果总是和第二大特征值符合。进过验证,矩阵 A 的最大特征值对应的特征向量与我们取的初始向量近似正交。根据幂法的条件, $\alpha_1 \neq 0$ 的条件不成立,因而我们取这一初始向量不可能求得最大特征值。关于这一矩阵,我们可以引入离散弦振动的模态进行解释:对于一个由 n 个离散质点相连组成的系统,收到小扰动后研究它的震动,根据受力分析,我们得到的刚度矩阵 K 无量纲化之后正是题目所给的三对角矩阵。由振动理论可知,其最大特征值对应的特征向量正是 n 阶模态,其分量满足:

$$x_{1i} = \sin(\frac{in\pi}{n+1})\tag{1}$$

当我们对所有分量求和:

$$S = \sum_{i=1}^{n} x_{1i} = \sum_{i=1}^{n} \sin(\frac{in\pi}{n+1})$$
 (2)

可知阶数 n 越大,每个分量就越接近 0,S 也越接近 0,也就是越接近正交。在此时我们使用全为 1 的初始向量将只能得到第二大的特征值。从这个例子我们也可以看出初始向量选用的重要性(要保证 $\alpha_1 \neq 0$)。

n	Error-Jacobi	Time(s)-Jacobi	Error-QR	Time-QR
10	5.5477E-12	1.8905E-03	5.4705E-10	8.8029E-04
15	7.9283E-12	5.4607E-03	1.2083E-09	2.9253E-03
20	1.0569E-12	1.5440E-01	2.0849E-09	5.6130E-03
25	3.3381E-10	4.8381E-01	3.1983E-09	1.0744E-02
30	4.0980E-05	2.2167E+00	4.5558E-09	1.9669E-02
35	1.4726E-06	1.2503E+00	6.2010E-09	2.7967E-01
40	2.2948E-06	3.2657E+00	7.9909E-09	3.9029E-01
45	1.5277E-05	2.9532E+00	1.0084E-08	4.6503E-01
50	8.9198E-04	4.8666E+00	1.2441E-08	2.3458E+00
55	3.7746E-03	4.9047E+00	1.4962E-08	2.0767E+00
60	4.8558E-02	4.3155E+00	1.7771E-08	2.8789E+00
65	3.0676E-02	5.4926E+00	2.0786E-08	3.5939E+00
70				
75				
100	8.6408E-02	3.4119E+01	4.8647E-08	1.5474E+01
75 80 85 90 95	3.7640E-02 5.3952E-02 8.9186E-02 1.0053E-01 6.2620E-02 1.3982E-01 8.6408E-02	7.0014E+00 8.6212E+00 1.0377E+01 1.5038E+01 1.6986E+01 3.2012E+01 3.4119E+01	2.4073E-08 2.7562E-08 3.1329E-08 3.5313E-08 3.9528E-08 4.3990E-08 4.8647E-08	4.1761E+00 5.2806E+00 6.2575E+00 7.4283E+00 1.0795E+01 1.5688E+01 1.5474E+01

图 2: 计算结果

五、 结论

在本实验中,我们分别采用了 Jacobi 过关法、QR 分解法和幂法求解矩阵的特征值,并对 Jacobi 过关法和 QR 分解法的精度和速度分别进行了分析。在精度设置得当的情况下, Jacobi 方法和 QR 方法都可以获得准确结果,但是 QR 方法在精度和速度上仍然更胜一筹。同时,我们在本实验中证实了幂法可以求解指定特征值,且求解的前提是选取的初始向量不得与该特征值对应的特征向量正交甚至是近似正交。

六、 特别鸣谢

特别感谢力1的罗俊林和黄天成同学。我在尝试使用幂法求解最大特征值时发现了这一现象,但并未找到原因所在,经过罗俊林同学提醒可能与初始向量和最大特征值对应的特征

向量正交有关之后,我和黄天成同学对原矩阵的特征向量进行了点积的核实,证实了罗俊林同学的观点,同时我们对于这发生正交现象的原因进行了进一步的理论分析,结合离散弦振动的模态叠加法理论,成功得到了最终结论。