变换法
Transformation

Tuesday, March 9, 2010

变换法

$$\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{I}$$
$$\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\Lambda}$$

通过变换的方法使***K***、***M***化为对角形

$$\boldsymbol{K}_1 = \boldsymbol{K} \qquad \boldsymbol{P}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}_k = \boldsymbol{I} \qquad \boldsymbol{K}_{k+1} = \boldsymbol{P}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_k\boldsymbol{P}_k = \boldsymbol{P}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}_{k-1}^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{P}_1\cdots\boldsymbol{P}_{k-1}\boldsymbol{P}_k$$
$$\boldsymbol{M}_1 = \boldsymbol{M} \qquad \boldsymbol{M}_{k+1} = \boldsymbol{P}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}_k\boldsymbol{P}_k = \boldsymbol{P}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}_{k-1}^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}_1\boldsymbol{P}_1\cdots\boldsymbol{P}_{k-1}\boldsymbol{P}_k$$

$$k \to \infty \qquad \boldsymbol{K}_{k+1} \to \mathrm{diag}(k_1, k_2, \cdots k_n)$$
$$\boldsymbol{M}_{k+1} \to \mathrm{diag}(m_1, m_2, \cdots, m_n)$$

$$\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\frac{k_1}{m_1}, \frac{k_2}{m_2}, \cdots \frac{k_n}{m_n})$$

$$\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{P}_1\boldsymbol{P}_2\cdots\boldsymbol{P}_k\,\mathrm{diag}(\frac{1}{\sqrt{m_1}}, \frac{1}{\sqrt{m_2}}, \cdots, \frac{1}{\sqrt{m_n}})$$

如何构造$\boldsymbol{P}_k$?
- Jacobi法
- QR迭代法

雅克比法

只能求解标准特征值问题

将$\boldsymbol{P}_k$取为旋转矩阵，一次使一个非对角元为零。

$$\boldsymbol{P}_k = \begin{array}{cc} \begin{array}{ccccccccccc} & & & i & & & & j & & & \end{array} & \\ \left[\begin{array}{ccccccccccc} 1 &&&&&&&&&& \\ & \ddots &&&&&&&&& \\ && 1 &&&&&&&& \\ &&& \cos\theta &&&& -\sin\theta &&& \\ &&&& 1 &&&&&& \\ &&&&& \ddots &&&&& \\ &&&&&& 1 &&&& \\ &&& \sin\theta &&&& \cos\theta &&& \\ &&&&&&&& 1 && \\ &&&&&&&&& \ddots & \\ &&&&&&&&&& 1 \end{array}\right] & \begin{array}{c} \\ \\ \\ i \\ \\ \\ \\ j \\ \\ \\ \\ \end{array} \end{array}$$

θ为旋转角。

雅克比法

$$K_{ij}^{(k+1)} = (K_{jj}^{(k)} - K_{ii}^{(k)})\sin\theta\cos\theta + K_{ij}^{(k)}(\cos^2\theta - \sin^2\theta)$$
$$= 0$$

$$\tan 2\theta = \frac{2K_{ij}^{(k)}}{K_{ii}^{(k)} - K_{jj}^{(k)}} \qquad K_{ii}^{(k)} \neq K_{jj}^{(k)}$$

$$\theta = \frac{\pi}{4} \qquad K_{ii}^{(k)} = K_{jj}^{(k)}$$

讨论

- 阀值雅克比法 Threshold Jacobi method

  对矩阵的上三角逐行(或逐列)依次扫描，若某非对角元的绝对值大于阀值，就对它进行旋转，直至所有的非对角元的绝对值都小于该阀值
- 收敛条件

$$\frac{\left|K_{ii}^{(k+1)} - K_{ii}^{(k)}\right|}{\left|K_{ii}^{(k+1)}\right|} \le 10^{-s} \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

$$\left[\frac{(K_{ij}^{(k+1)})^2}{K_{ii}^{(k+1)}K_{jj}^{(k+1)}}\right]^{\frac{1}{2}} \le 10^{-s} \qquad j = 1, 2, \cdots, n; i < j$$

讨论

- 迭代过程
  - 初始化当前循环的阀值。第m次循环的阀值一般可取为10^{-2m}
  - 对所有(i, j) $(i < j)$计算耦合系数 ， 如果大于当前的阀值，则进行旋转变换。
  - 检查是否收敛。如未收敛转向1，开始新一轮循环。

讨论

- 收敛性

$$K\phi=\lambda\phi \qquad K=\begin{bmatrix}K_{11} & O(\varepsilon) & O(\varepsilon)\\ O(\varepsilon) & K_{22} & O(\varepsilon)\\ O(\varepsilon) & O(\varepsilon) & K_{33}\end{bmatrix}$$

$$\tan 2\theta=\frac{2K_{ij}^{(k)}}{K_{ii}^{(k)}-K_{jj}^{(k)}} \qquad \begin{aligned}\sin\theta&=\theta\\ \cos\theta&=1\end{aligned}$$

$$\theta=\frac{K_{ij}^{(k)}}{K_{ii}^{(k)}-K_{jj}^{(k)}}=\frac{O(\varepsilon)}{K_{ii}^{(k)}-K_{jj}^{(k)}}$$

讨论

$$K_1=K$$

$$K_2=P_1^{\mathrm{T}}K_1P_1=\begin{bmatrix}K_{11}+O(\varepsilon^2) & 0 & O(\varepsilon)\\ 0 & K_{22}+O(\varepsilon^2) & O(\varepsilon)\\ O(\varepsilon) & O(\varepsilon) & K_{33}\end{bmatrix}$$

$$K_3=\begin{bmatrix}K_{11}+O(\varepsilon^2) & O(\varepsilon^2) & 0\\ O(\varepsilon^2) & K_{22}+O(\varepsilon^2) & O(\varepsilon)\\ 0 & O(\varepsilon) & K_{33}+O(\varepsilon^2)\end{bmatrix}$$

$$K_4=\begin{bmatrix}K_{11}+O(\varepsilon^2) & O(\varepsilon^2) & O(\varepsilon^2)\\ O(\varepsilon^2) & K_{22}+O(\varepsilon^2) & 0\\ O(\varepsilon^2) & 0 & K_{33}+O(\varepsilon^2)\end{bmatrix}$$

收敛是二次的！

例3-3

用Jacobi法求解标准特征值问题$K\phi=\lambda\phi$，其中

$$K=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

例3-3

对矩阵K的上三角逐行扫描，先消除非对角元K_{12}：

$$\theta=\frac{1}{2}\arctan\frac{2}{1-1}=\frac{\pi}{4} \qquad K=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

$$P_1=\begin{bmatrix}\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 & 0\\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

$$K_2=P_1^{\mathrm{T}}K_1P_1=\begin{bmatrix}2.0 & 0.0 & \sqrt{2}\\ 0.0 & 0.0 & 0.0\\ \sqrt{2} & 0.0 & 1.0\end{bmatrix}$$

例3-3

再消除非对角元K_{13}

$$K_2=\begin{bmatrix}2.0 & 0.0 & \sqrt{2}\\ 0.0 & 0.0 & 0.0\\ \sqrt{2} & 0.0 & 1.0\end{bmatrix}$$

$$\theta=\frac{1}{2}\arctan\frac{2\sqrt{2}}{2-1}=35.2^\circ$$

$$P_2=\begin{bmatrix}\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & -\sqrt{\frac{1}{3}}\\ 0 & 1 & 0\\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}}\end{bmatrix} \qquad \Phi=P_1P_2=\begin{bmatrix}\frac{\sqrt{3}}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{6}}{6}\\ \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{6}}{6}\\ \frac{\sqrt{3}}{3} & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}}\end{bmatrix}$$

$$K_3=P_2^{\mathrm{T}}K_2P_2=\begin{bmatrix}3 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix} \qquad \Lambda=K_3=\begin{bmatrix}3 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

广义雅克比法

雅克比法能否求解广义特征值问题$K\phi=\lambda M\phi$?

$$P_k=\begin{array}{cc}\begin{matrix} & & i & & j & & \end{matrix} & \\ \begin{bmatrix}1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & \alpha & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & \gamma & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1\end{bmatrix} & \begin{matrix} \\ \\ i\\ \\ j\\ \\ \\ \end{matrix}\end{array}$$

广义雅克比法

$$K_{ij}^{(k+1)} = \alpha K_{ii}^{(k)} + (1+\alpha\gamma)K_{ij}^{(k)} + \gamma K_{jj}^{(k)} = 0$$

$$M_{ij}^{(k+1)} = \alpha M_{ii}^{(k)} + (1+\alpha\gamma)M_{ij}^{(k)} + \gamma M_{jj}^{(k)} = 0$$

当 $\dfrac{K_{ii}^{(k)}}{M_{ii}^{(k)}} = \dfrac{K_{ij}^{(k)}}{M_{ij}^{(k)}} = \dfrac{K_{jj}^{(k)}}{M_{jj}^{(k)}}$ 时：$\alpha = 0,\quad \gamma = -\dfrac{K_{ij}^{(k)}}{K_{jj}^{(k)}}$

否则：$\gamma = -\dfrac{\bar{K}_{ii}^{(k)}}{x},\quad \alpha = \dfrac{\bar{K}_{jj}^{(k)}}{x}$

$$\bar{K}_{ii}^{(k)} = K_{ii}^{(k)} M_{ij}^{(k)} - M_{ii}^{(k)} K_{ij}^{(k)}$$

$$\bar{K}_{jj}^{(k)} = K_{jj}^{(k)} M_{ij}^{(k)} - M_{jj}^{(k)} K_{ij}^{(k)}$$

$$x = \frac{\bar{K}^{(k)}}{2} + \mathrm{sign}(\bar{K}^{(k)})\sqrt{\left(\frac{\bar{K}^{(k)}}{2}\right)^2 + \bar{K}_{ii}^{(k)} \bar{K}_{jj}^{(k)}}$$

$$\bar{K}^{(k)} = K_{ii}^{(k)} M_{jj}^{(k)} - K_{jj}^{(k)} M_{ii}^{(k)}$$

讨论

- 特征值

$$\lambda_i^{(k+1)} = K_{ii}^{(k+1)} / M_{ii}^{(k+1)}$$

- 耦合系数

$$[(K_{ij}^{(k)})^2 / (K_{ii}^{(k)} K_{jj}^{(k)})]^{\frac{1}{2}},\quad [(M_{ij}^{(k)})^2 / (M_{ii}^{(k)} M_{jj}^{(k)})]^{\frac{1}{2}}$$

- 同时对$\boldsymbol{K}$和$\boldsymbol{M}$变换

$$\boldsymbol{K}_{k+1} = \boldsymbol{P}_k^T \boldsymbol{K}_k \boldsymbol{P}_k \qquad \boldsymbol{M}_{k+1} = \boldsymbol{P}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{M}_k \boldsymbol{P}_k$$

- 收敛条件

$$\frac{\left|\lambda_i^{(k+1)} - \lambda_i^{(k)}\right|}{\lambda_i^{(k+1)}} \le 10^{-s};\quad i = 1,\cdots,n$$

$$\left[\frac{(K_{ij}^{(k+1)})^2}{K_{ii}^{(k+1)} K_{jj}^{(k+1)}}\right]^{\frac{1}{2}} \le 10^{-s};\quad \left[\frac{(M_{ij}^{(k+1)})^2}{M_{ii}^{(k+1)} M_{jj}^{(k+1)}}\right]^{\frac{1}{2}} \le 10^{-s};\quad i < j$$

小结

- 求解小型问题时效率很高：只涉及两行和两列的线性组合；只需对上三角阵进行运算
- 如$\boldsymbol{K}$和$\boldsymbol{M}$已接近对角形，则收敛很快；
- 同时给出了所有的特征对；
- 对大型问题计算量很大—需和其它方法连用；
- 可计算零特征值、负特征值；
- 示例程序JACOBI90（可下载）；

例3-4

用广义Jacobi法求解两端简支等直梁的固有频率与主振型

$$\boldsymbol{K} = \frac{2EJ}{L}\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{M} = \frac{\rho A L^3}{420}\begin{bmatrix} 4 & -3 \\ -3 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\bar{K}_{11}^{(1)} = 2\cdot(-3) - 4\cdot 1 = -10 \qquad x = 0 + \sqrt{0+100} = 10$$

$$\bar{K}_{22}^{(1)} = 2\cdot(-3) - 4\cdot 1 = -10 \qquad \gamma = -\frac{-10}{10} = 1$$

$$\bar{K}^{(1)} = 2\cdot 4 - 2\cdot 4 = 0 \qquad \alpha = \frac{-10}{10} = -1$$

$$\boldsymbol{P}_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{K}_2 = \frac{2EJ}{L}\begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{M}_2 = \frac{\rho A L^3}{420}\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 14 \end{bmatrix}$$

例3-4

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \dfrac{K_1^{(2)}}{M_1^{(2)}} & 0 \\ 0 & \dfrac{K_2^{(2)}}{M_2^{(2)}} \end{bmatrix} = \frac{840EJ}{\rho A L^4}\begin{bmatrix} 3 & \\ & \dfrac{1}{7} \end{bmatrix}$$

$$\omega_1 = 10.95\sqrt{\frac{EJ}{\bar{m}L^4}} \qquad \omega_2 = 50.20\sqrt{\frac{EJ}{\bar{m}L^4}} \qquad \bar{m} = \rho A$$

Householder-QR-Inverse iteration solution

- 只能求解标准特征值问题
  - Householder变换法：$\boldsymbol{K} \to$ 三对角矩阵
  - QR迭代法求解所有特征值
  - 利用逆迭代法求解需要的特征向量

Householder变换法

- 包括n-2次正交变换
  - 第1次：将$\boldsymbol{K}_1=\boldsymbol{K}$的第1行第1列三角化，得$\boldsymbol{K}_2$
  - 第2次：将$\boldsymbol{K}_2$的第2行第2列三角化，得$\boldsymbol{K}_3$
  - … …
  - 第n-2次，将$\boldsymbol{K}_{n-2}$的第n-2行第n-2列三对角化
- 如何构造正交矩阵$\boldsymbol{P}_1$，使得 $\boldsymbol{K}_2=\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{P}_1$ 的第1行第1列三对角化？

$$\boldsymbol{K}_1=\begin{bmatrix} k_{11} & \boldsymbol{k}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{k}_1 & \boldsymbol{K}_{11}\end{bmatrix} \xrightarrow[\boldsymbol{P}_1=?]{\boldsymbol{K}_2=\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{P}_1} \boldsymbol{K}_2=\begin{bmatrix} k_{11} & * & 0 & \cdots & 0 \\ * & & & & \\ 0 & & \bar{\boldsymbol{K}}_2 & & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & & \end{bmatrix}$$

利用反射变换，选取适当的反射面，将$\boldsymbol{k}_1$变换为只有第1个元素不为零的向量。

Householder变换法

反射变换

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}-\theta\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \qquad \theta=\frac{2}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}}$$

$\boldsymbol{w}$垂直于反射面

$\boldsymbol{w}$大小不重要，重要的是其方向

- $\boldsymbol{P}$是正交矩阵

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{P}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}&=(\boldsymbol{I}-\theta\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{I}-\theta\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}})\\&=\boldsymbol{I}-2\theta\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}+\theta^2\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\\&=\boldsymbol{I}\end{aligned}$$

- $\boldsymbol{P}\boldsymbol{u}$是$\boldsymbol{u}$关于反射面的镜像

$$(\boldsymbol{P}\boldsymbol{u})_w=-(\boldsymbol{u})_w$$

$$(\boldsymbol{P}\boldsymbol{u})_{\perp w}=(\boldsymbol{u})_{\perp w}$$

Householder变换法

$$\boldsymbol{K}_1=\begin{bmatrix} k_{11} & \boldsymbol{k}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{k}_1 & \boldsymbol{K}_{11}\end{bmatrix} \xrightarrow[\boldsymbol{P}_1=\boldsymbol{I}-\theta_1\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{w}_1^{\mathrm{T}}]{\boldsymbol{K}_2=\boldsymbol{P}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_1\boldsymbol{P}_1} \boldsymbol{K}_2=\begin{bmatrix} k_{11} & * & 0 & \cdots & 0 \\ * & & & & \\ 0 & & \bar{\boldsymbol{K}}_2 & & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & & \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{P}_1=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \bar{\boldsymbol{P}}_1\end{bmatrix} \quad \boldsymbol{w}_1=\begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\boldsymbol{w}}_1\end{bmatrix} \quad \bar{\boldsymbol{P}}_1=\boldsymbol{I}-\theta_1\bar{\boldsymbol{w}}_1\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{K}_2=\begin{bmatrix} k_{11} & \boldsymbol{k}_1^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{P}}_1 \\ \bar{\boldsymbol{P}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{k}_1 & \bar{\boldsymbol{P}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_{11}\bar{\boldsymbol{P}}_1\end{bmatrix} \qquad \bar{\boldsymbol{K}}_2=\bar{\boldsymbol{P}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_{11}\bar{\boldsymbol{P}}$$

反射变换不改变向量的长度：

$$\bar{\boldsymbol{P}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{k}_1=(\boldsymbol{I}-\theta_1\bar{\boldsymbol{w}}_1\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}})\boldsymbol{k}_1=\pm\|\boldsymbol{k}_1\|_2\,\boldsymbol{e}_1$$

$$(\theta_1\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{k}_1)\bar{\boldsymbol{w}}_1=\boldsymbol{k}_1\pm\|\boldsymbol{k}_1\|_2\,\boldsymbol{e}_1 \Longrightarrow \bar{\boldsymbol{w}}_1=\boldsymbol{k}_1+\mathrm{sign}(k_{21})\|\boldsymbol{k}_1\|_2\,\boldsymbol{e}_1$$

对做$\bar{\boldsymbol{K}}_2$类似处理，可将$\boldsymbol{K}_2$的第2行第2列化为三对角形

Householder变换法

- 程序实现
  - $\boldsymbol{K}_1$、$\boldsymbol{K}_2$、…、$\boldsymbol{K}_{n\text{-}1}$均是对称的，只存上三角
  - 改变了矩阵的$\boldsymbol{K}$轮廓
  - 计算效率

$$\bar{\boldsymbol{K}}_2=\bar{\boldsymbol{P}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_{11}\bar{\boldsymbol{P}} \qquad \bar{\boldsymbol{P}}_1=\boldsymbol{I}-\theta_1\bar{\boldsymbol{w}}_1\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}} \quad \text{—— } 2n^3\text{次运算}$$

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{K}}_2&=(\boldsymbol{I}-\theta_1\bar{\boldsymbol{w}}_1\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}})\boldsymbol{K}_{11}(\boldsymbol{I}-\theta_1\bar{\boldsymbol{w}}_1\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}})\\&=\boldsymbol{K}_{11}-\theta_1\bar{\boldsymbol{w}}_1\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_{11}-(\theta_1\boldsymbol{K}_{11}\bar{\boldsymbol{w}}_1-\theta_1^2\bar{\boldsymbol{w}}_1\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_{11}\bar{\boldsymbol{w}}_1)\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}}\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{K}_{11}\bar{\boldsymbol{w}}_1$$

$$\boldsymbol{p}_1=\theta_1\boldsymbol{v}_1$$

$$\beta_1=\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_1$$

$$\boldsymbol{q}_1=\boldsymbol{p}_1-\theta_1\beta_1\bar{\boldsymbol{w}}_1$$

$$m=n-1$$

$$\bar{\boldsymbol{K}}_2=\boldsymbol{K}_{11}-\bar{\boldsymbol{w}}_1\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{q}_1\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}} \quad \text{—— } 3m^2+3m\text{次运算}$$

Householder变换法 例

$$\boldsymbol{K}=\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ -4 & 6 & -4 & 1 \\ 1 & -4 & 6 & -4 \\ 0 & 1 & -4 & 5\end{bmatrix}$$

$$\bar{\boldsymbol{w}}_1=\boldsymbol{k}_1+\mathrm{sign}(k_{21})\|\boldsymbol{k}_1\|_2\,\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix} -4 \\ 1 \\ 0\end{bmatrix}-4.1231\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -8.1231 \\ 1 \\ 0\end{bmatrix}$$

$$\theta_1=\frac{2}{\bar{\boldsymbol{w}}_1^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{w}}_1}=0.0298575$$

$$\boldsymbol{P}_1=\boldsymbol{I}-\theta_1\boldsymbol{w}_1\boldsymbol{w}_1^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.9701 & 0.2425 & 0 \\ 0 & 0.2425 & 0.9701 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{K}_2=\begin{bmatrix} 5 & 4.1231 & 0 & 0 \\ 4.1231 & 7.8823 & 3.5294 & -1.9403 \\ 0 & 3.5294 & 4.1177 & -3.6380 \\ 0 & -1.9403 & -3.6380 & 5\end{bmatrix}$$

Householder变换法 例

$$\bar{\boldsymbol{w}}_2=\boldsymbol{k}_2+\mathrm{sign}(k_{32})\|\boldsymbol{k}_2\|_2\,\boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix} 3.5294 \\ -1.9403\end{bmatrix}+4.0276\begin{bmatrix} 1 \\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 7.5570 \\ -1.9403\end{bmatrix}$$

$$\theta_2=\frac{2}{\bar{\boldsymbol{w}}_2^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{w}}_2}=0.0328553$$

$$\boldsymbol{P}_2=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.8763 & 0.4817 \\ 0 & 0 & 0.4817 & 0.8763\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{K}_3=\begin{bmatrix} 5 & 4.1231 & 0 & 0 \\ 4.1231 & 7.8823 & -4.0276 & 0 \\ 0 & -4.0276 & 7.3941 & 2.3219 \\ 0 & 0 & 2.3219 & 1.7236\end{bmatrix}$$

QR迭代法

对矩阵$\boldsymbol{K}$作$\boldsymbol{QR}$分解：

$\boldsymbol{K}=\boldsymbol{QR}$ $\quad\boldsymbol{Q}$ — 正交矩阵；$\boldsymbol{R}$ — 上三角矩阵

$\Downarrow$

$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{RQ}$ $\quad\boldsymbol{K}_{k+1}=\boldsymbol{P}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_k\boldsymbol{P}_k$

计算$\boldsymbol{RQ}$相当于对矩阵$\boldsymbol{K}$作正交变换！

$$\boldsymbol{K}_k=\boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{R}_k$$

$$\boldsymbol{K}_{k+1}=\boldsymbol{R}_k\boldsymbol{Q}_k$$

$$\boldsymbol{K}_{k+1}\to\boldsymbol{\Lambda}$$

$$\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{k-1}\boldsymbol{Q}_k\to\boldsymbol{\Phi}$$

QR迭代法

可以证明，$\boldsymbol{QR}$迭代法与逆迭代法密切相关

$$\boldsymbol{K}_k-\mu_k\boldsymbol{I}=\boldsymbol{Q}_k\boldsymbol{R}_k$$

$$\boldsymbol{K}_{k+1}=\boldsymbol{R}_k\boldsymbol{Q}_k+\mu_k\boldsymbol{I}$$

当μ_k取为矩阵K_k的对角元时，迭代具有三次收敛性

$$\boldsymbol{K}_{k+1}\to\boldsymbol{\Lambda}$$

$$\boldsymbol{Q}_1\cdots\boldsymbol{Q}_{k-1}\boldsymbol{Q}_k\to\boldsymbol{\Phi}$$

当$\boldsymbol{K}$为三对角阵时，QR迭代法的效率极高 — 可以显式计算K_{k+1}。

特征向量的计算

可采用带移轴的逆迭代法计算所需的特征向量，一般只需两次迭代即收敛！

将矩阵$\boldsymbol{T}_1$的特征向量记为$\boldsymbol{\psi}_i$，矩阵K的特征向量为：

$$\boldsymbol{\phi}_i=\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{P}_2\cdots\boldsymbol{P}_{n-2}\boldsymbol{\psi}_i$$