子空间迭代法
Subspace Iteration Method

Tuesday, March 9, 2010

讨论

- 几种求解特征值问题的方法
  - 向量迭代法：一次只能求解一个特征对
  - 变换法：适合于求解小规模问题
  - 瑞利-里兹法：结果取决于里兹向量的选取
- 能否结合各种方法的优点，建立有效的方法？
  - 向量迭代法：　同时迭代
  - 瑞利-里兹法：取迭代向量为里兹向量
  - 变换法：求解用瑞利-里兹法缩减变量后的特征值问题

同时迭代法

- **能否使用多个迭代向量同时迭代？**

$$\boldsymbol{K}\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}=\boldsymbol{M}\boldsymbol{X}_k$$

- **能否同时得到多个不同的低阶特征对？**

$$\boldsymbol{\Phi}_L=[\phi_1\ \phi_2\ \cdots\phi_q] \qquad \boldsymbol{\Phi}_H=[\phi_{q+1}\ \phi_{q+2}\ \cdots\ \phi_n]$$

$$\boldsymbol{\Lambda}_L=\mathrm{diag}(\lambda_1\ \lambda_2\ \cdots\ \ \lambda_q) \qquad \boldsymbol{\Lambda}_H=\mathrm{diag}(\lambda_{q+1}\ \lambda_{q+2}\ \cdots\lambda_n)$$

$$\begin{matrix}\boldsymbol{K}\boldsymbol{\Phi}_L=\boldsymbol{M}\boldsymbol{\Phi}_L\boldsymbol{\Lambda}_L\\ \boldsymbol{K}\boldsymbol{\Phi}_H=\boldsymbol{M}\boldsymbol{\Phi}_{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Lambda}_H\end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix}\boldsymbol{\Phi}_L\boldsymbol{\Lambda}_L^{-1}=\boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{M}\boldsymbol{\Phi}_L\\ \boldsymbol{\Phi}_H\boldsymbol{\Lambda}_H^{-1}=\boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{M}\boldsymbol{\Phi}_H\end{matrix}$$

$$\boldsymbol{X}_1=[\boldsymbol{\Phi}_L\ \ \boldsymbol{\Phi}_H]\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_L\\ \boldsymbol{B}_H\end{bmatrix}=\boldsymbol{\Phi}_L\boldsymbol{B}_L+\boldsymbol{\Phi}_H\boldsymbol{B}_H$$

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{X}}_2&=\boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{M}\boldsymbol{X}_1\\ &=\boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{M}\left(\boldsymbol{\Phi}_L\boldsymbol{B}_L+\boldsymbol{\Phi}_H\boldsymbol{B}_H\right)\\ &=\boldsymbol{\Phi}_L\boldsymbol{\Lambda}_L^{-1}\boldsymbol{B}_L+\boldsymbol{\Phi}_H\boldsymbol{\Lambda}_H^{-1}\boldsymbol{B}_H\end{aligned}$$

各列都趋向于$\boldsymbol{\phi}_1$！

$$\Rightarrow \boldsymbol{X}_{k+1}\to[\phi_1\ \ \phi_1\ \ \cdots\ \ \phi_1]$$

同时迭代法

- **解决办法**
  - 对 $\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}$ 进行Gram-Schmidt正交化

    当$\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}=\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{B}$时，仍需迭代！
  - 瑞利-里兹法

    以$\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}$作为里兹基：　$\boldsymbol{X}_{k+1}=\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}\bar{\boldsymbol{\Phi}}$

$$\bar{\boldsymbol{K}}\bar{\boldsymbol{\Phi}}=\bar{\boldsymbol{M}}\bar{\boldsymbol{\Phi}}\bar{\boldsymbol{\Lambda}} \Rightarrow (\bar{\boldsymbol{\Lambda}},\bar{\boldsymbol{\Phi}}) \qquad \boldsymbol{\Lambda}=\bar{\boldsymbol{\Lambda}}$$

$$\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{X}_{k+1}=\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}\bar{\boldsymbol{\Phi}}$$

$$\bar{\boldsymbol{K}}=\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}^T\boldsymbol{K}\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}$$

$$\bar{\boldsymbol{M}}=\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}^T\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}$$

  - $\boldsymbol{X}_{k+1}$关于$\boldsymbol{K}$和$\boldsymbol{M}$正交
  - $\boldsymbol{X}_{k+1}$更接近于阵型矩阵

- **同时迭代法**：对假设振型进行改进
- **瑞利-里兹法**：求解改进后的近似特征对
- **子空间$\boldsymbol{E}_{k+1}\to\boldsymbol{E}_\infty$**：子空间迭代法

子空间迭代

1. 选取初始迭代矩阵$\boldsymbol{X}_1=[\boldsymbol{x}_1^{(1)}\ \boldsymbol{x}_1^{(2)}\cdots\boldsymbol{x}_1^{(q)}]$，计算 $\boldsymbol{Y}_1=\boldsymbol{M}\boldsymbol{X}_1$，并令$k=1$
2. 解方程 $\boldsymbol{K}\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}=\boldsymbol{Y}_k$
3. 计算$\bar{\boldsymbol{Y}}_{k+1}=\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}$

同时迭代法

4. 计算$\bar{\boldsymbol{K}}=\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}^T\boldsymbol{Y}_k$　　$\bar{\boldsymbol{M}}=\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}^T\bar{\boldsymbol{Y}}_{k+1}$
5. 求解广义特征值问题$\bar{\boldsymbol{K}}\bar{\phi}=\bar{\lambda}\bar{\boldsymbol{M}}\bar{\phi}$

   $\bar{\boldsymbol{\Lambda}}=\mathrm{diag}(\bar{\lambda}_1,\bar{\lambda}_2,\cdots,\bar{\lambda}_q)$　　$\bar{\boldsymbol{\Phi}}=[\bar{\phi}_1,\bar{\phi}_2,\cdots,\bar{\phi}_q]$

瑞利-里兹法

6. 收敛否？$\left|\lambda_i^{(k+1)}-\lambda_i^{(k)}\right|/\lambda_i^{(k+1)}<\mathrm{tol}$
   - 是：Sturm序列检查是否漏根

     $\bar{\boldsymbol{\Phi}}=\boldsymbol{X}_{k+1}=\bar{\boldsymbol{X}}_{k+1}\bar{\boldsymbol{\Phi}}$　$\boldsymbol{\Lambda}=[\bar{\lambda}_1,\bar{\lambda}_2,\cdots,\bar{\lambda}_q]$
   - 否：转向$\boldsymbol{Y}_{k+1}=\bar{\boldsymbol{Y}}_{k+1}\bar{\boldsymbol{\Phi}}$步骤2继续迭代

初始迭代向量的选取

- $\boldsymbol{x}_1^{(i)}$ $(i=1,2,\cdots q)$ 不能与ϕ_i正交；
- 如果E_1和E_∞等同，则一次迭代即收敛；
- 几种选取方法：
  - $\boldsymbol{x}_1^{(1)}=\boldsymbol{1}$　$\boldsymbol{x}_1^{(i)}=\boldsymbol{e}_j$　$(i\ge 2,\ \dfrac{K_{jj}}{M_{jj}}\le\dfrac{K_{ii}}{M_{ii}})$
  - Lanczos法
  - 动力修改问题

收敛率

$k \to \infty$：$\boldsymbol{X}_{k+1}^{(i)} \to \phi_i$， $\bar{\lambda}_i \to \lambda_i$

收敛率 $\dfrac{\lambda_i}{\lambda_{q+1}}, \left(\dfrac{\lambda_i}{\lambda_{q+1}}\right)^2$ — 低阶特征值收敛快！

一般取：$q = \min(2p，p+8)$

SSPACE90子程序（可下载）

例3-6

用瑞利一里兹法求解广义特征值问题 $\boldsymbol{K}\phi = \lambda \boldsymbol{M}\phi$ 的近似解，其中

$$\boldsymbol{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}; \quad \boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

本问题的精确解为：$\lambda_1 = 2, \lambda_2 = 4, \lambda_3 = 6$

例3-6

取$q = 2$：$\boldsymbol{X}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$； $\boldsymbol{Y}_1 = \boldsymbol{M}\boldsymbol{X}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$

$$\bar{\boldsymbol{X}}_2 = \boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{Y}_1 = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.29167 \\ 0.5 & 0.08333 \\ 0.5 & 0.04167 \end{bmatrix} \qquad \bar{\boldsymbol{Y}}_2 = \boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{X}}_2 = \begin{bmatrix} 0.25 & 0.14583 \\ 0.25 & 0.08333 \\ 0.25 & 0.02083 \end{bmatrix}$$

$$\bar{\boldsymbol{K}} = \bar{\boldsymbol{X}}_2^T \boldsymbol{Y}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0.25 \\ 0.25 & 0.14583 \end{bmatrix} \qquad \bar{\boldsymbol{M}} = \bar{\boldsymbol{X}}_2^T \bar{\boldsymbol{Y}}_2 = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.125 \\ 0.125 & 0.05035 \end{bmatrix}$$

例3-6

$$\bar{\boldsymbol{\Lambda}} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4.3636 \end{bmatrix}, \quad \bar{\boldsymbol{\Phi}} = \begin{bmatrix} -1 & 0.242535 \\ 0 & -0.9701425 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 \\ 0.0 & 4.21874 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 \\ 0.0 & 4.17978 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 \\ 0.0 & 4.10378 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 \\ 0.0 & 4.0841 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 \\ 0.0 & 4.047557 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 \\ 0.0 & 4.03827 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 \\ 0.0 & 4.02143 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 \\ 0.0 & 4.01719 \end{bmatrix}$$

例3-6

经过16次迭代收敛 ($\mathrm{tol} = 10^{-6}$)

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} 2.0 & 0 \\ 0 & 4.0000023 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} -0.7071 & -1.0008 \\ -0.7071 & 0.0008 \\ -0.7071 & 0.9992 \end{bmatrix}$$

例3-6

取$q = 3$： $\boldsymbol{X}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

只需一次迭代即得到了精确解

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} 2 & & \\ & 4 & \\ & & 6 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} -0.7071 & -1.0 & 0.7071 \\ -0.7071 & 0.0 & 0.7071 \\ -0.7071 & 1.0 & 0.7071 \end{bmatrix}$$

为什么？