关于不完全正交三角分解的算法构造与数值研究

殷俊锋

摘要

快速、准确且稳定地求解大型稀疏、非奇异非对称线性代数方程组是科学与工程计算研究领域中的最基本问题之一。研究关于这类问题的预处理迭代算法，特别是预处理子的构造和性质，是一项具有重要的理论意义和很高的实用价值的，且十分有挑战性的课题。

本文对基于Givens变换的不完全正交三角分解方法的理论和性质进行了进一步发展和深入的研究。结合矩阵的具体结构和性质，我们提出了比较系统、高效且实用的不完全正交三角分解算法，并进行了深入的理论分析和大量的数值实验。

理论结果表明，基于Givens变换的不完全正交三角分解方法数值上稳定，且总能得到一个正交矩阵Q和一个上三角矩阵R, 使得$A = QR - E$，其中E为满足一定约束的误差矩阵。特别，该正交矩阵Q可以存储为若干Givens变换；这给相应的迭代算法的预处理过程的具体实施带来了很大的方便。对于正规方程组的预处理共轭梯度法而言，由于Q的正交性，在构造预处理子的过程中，我们不需要存储矩阵Q，只需要在迭代的每步求解两个稀疏的三角方程组，再完成相应的广义残量方程的求解过程。

为了节省存储空间，我们首先提出了一类不引入非零元素的不完全正交三角分解算法，称之为IGO(0)方法。我们构造了基于该方法的预处理迭代算法，并对离散的偏微分方程和矩阵市场中的例子做了大量的数值实验。结果表明，IGO(0)方法是有效的，并且由它所诱导出的预处理迭代算法比相应的不完全三角分解方法具有更快的收敛速度。

其次，我们改进了不完全正交三角分解方法；通过将丢弃的非零元素以一定的策略补偿到对角元上，我们得到了MIGO方法。我们还给出了在不完全正交三角分解过程中关于对角补偿元素的数值选取的一个一般性公式。特别，对于求解离散的常系数偏微分方程，MIGO方法相当于给不完全正交三角分解方法增加了一个额外的强制约束。对于某些实际问题，这种预处理方法可以更加准确而快速地得到它们的数值解。数值实验也进一步佐证了这一点。

再次，利用矩阵的稀疏结构，我们提出了一个预先指定稀疏结构的、一般的、不完全正交三角分解(GIGO)方法。特别，我们构造了一个以矩阵的半带宽l为参数的不完全正交三角分解方法。该方法允许引入主对角线附近的宽为$2l + 1$的带状区域内的非零元素，称之为IGO(l)方法。如果参数l足够大，则我们可能会得到一个完全的正交三角分解。对于一些实际问题，我们做了大量的数值实验，并对IGO(l)方法中参数l的选取进行了详细的

讨论。

之后，我们提出了一个在不完全正交三角分解过程中考虑非零元素的大小，且允许引入数值较大的非零元素的不完全正交三角分解(IGO(τ))方法。考虑到计算机的实际存储和计算能力，我们通过引入另外一个参数p来限制非零元素的个数的增长。这种新的更为实用的方法被称为IGO(τ,p)方法。理论分析表明，IGO(τ)方法和IGO(τ,p)方法都是数值稳定的。大量的数值实验表明，IGO(τ)方法和IGO(τ,p)方法是可行且有效的。值得指出的是，在实际计算中，我们可以通过选择参数τ和p使总的迭代时间达到最优。

最后，对于最小二乘问题，我们将上述不完全正交三角分解方法推广到了长方矩阵的情形。理论分析表明，这类新方法同样是数值稳定的，且能够保持原不完全正交三角分解方法的优点。我们构造了用新方法做预处理子的，求解最小二乘问题的共轭梯度法和广义极小残量法。大量的数值实验表明，这种预处理方法是可行且十分有效的。

关键词: 线性代数方程组，迭代算法，预处理，不完全正交三角分解，Givens变换，最小二乘问题。