对称特征值问题的迭代加速与多项式预处理

菅帅

摘要

大型稀疏对称特征值问题在科学与工程计算领域有着广泛的应用, 而梯度型方法则是求解这类问题的一类简单却有效的方法. 带有预处理的块梯度型方法不仅所需内存少, 数值稳定性好, 而且收敛速度也可与其它类型的迭代方法相媲美. 因此, 对于这类方法的算法设计和理论分析是目前对称特征值问题研究中的热点. 本文主要针对块预处理梯度型方法以及 Rayleigh 商迭代法在迭代加速和预处理等方面进行了一些研究.

首先, 基于一种更精确的收敛性估计以及方程组求解时所用的多项式预处理技巧, 我们针对块最速下降法提出了一种新的预处理技巧. 在一定的合理假设下, 我们构造了两类多项式预处理子, 并从理论上证明了采用多项式预处理子时, 群体特征值的收敛速度要比采用标准预处理子时快得多. 进一步, 多项式预处理子还可以直接用于块共轭梯度法. 数值算例验证了多项式预处理子作用于两类块梯度型方法时的有效性以及较之标准预处理子的优越性.

其次, 在对原有复杂共轭条件进行简化的基础上, 我们提出了一种修正的 Jacobi 共轭预处理梯度法. 对于计算单个端部特征值的单向量迭代, 理论分析证明了修正方法与原有方法所采用的共轭性是渐近等价的; 而对于计算多个端部特征值的块迭代, 修正方法表现出与原有方法极为相似的收敛性, 但更少的矩阵乘积使得其计算量更少. 数值算例表明修正方法无论是对标准问题还是广义问题都是有效的, 而且在计算时间上要优于原有方法.

再次, 通过对搜索子空间的扩张, 我们提出了一种加速的局部最优块预处理共轭梯度法. 从理论的角度, 通过结合 Lanczos 方法以及广义 Davidson 方法, 可以推断加速方法与原有方法有着相同的渐近平均收敛因子. 然而, 在实际中, 尤其当原有方法由于预处理子较差或者块的大小不合适而表现不好时, 加速方法往往可以有效地节省迭代次数和计算量. 数值算例验证了在这些情况下加速方法较之原有方法的优越性.

最后, 我们提出了一种加速的 Rayleigh 商迭代法以及相应的非精确加速方法. 理论分析证明了这种将 Rayleigh 商迭代法与反幂法结合起来的方法相比原有方法要收敛得更快. 此外, 我们还研究了当共轭梯度法用于求解内部线性方程组时的收敛性质. 数值算例表明加速方法无论是在精确求解还是非精确求解时都要比原有方法更高效.

关键词: 对称特征值问题, Rayleigh–Ritz 过程, 最速下降法, 共轭梯度法, Rayleigh 商迭代