Hermite 特征值问题的预处理与迭代方法

苗存强

摘要

大型稀疏 Hermite 特征值问题在科学与工程计算领域有重要意义. 目前主要是通过迭代方法来计算其部分特征信息, 如 Krylov 子空间方法, 梯度型方法和 Davidson 型方法等. Davidson 型方法中的 Jacobi-Davidson 方法是通过求解一个所谓的修正方程来扩充当前的投影子空间,由于当前近似向量正交补空间中投影的作用, 使得当前近似向量接近目标特征向量时修正方程的系数矩阵保持正定, 同时该方法具有局部三次收敛速率. 由于多项式滤子迭代格式较为简单, 同时在迭代过程中不需要求解大型线性方程组, 因此用多项式作为滤子来加速当前近似向量的收敛也是目前研究的热点. 本文主要针对 Jacobi-Davidson 方法的收敛性分析, 多项式滤子的构造和新型算法的设计等方面进行了一些研究.

首先, 我们给出了 Jacobi-Davidson 方法的收敛性分析. 当内迭代修正方程用 Krylov 子空间方法求解时, 我们证明了非精确简化 Jacobi-Davidson 方法是局部二次收敛的. 当内迭代修正方程的求解精度达到当前近似向量残量范数的常数倍时, 该方法是局部三次收敛的. 自然的, 我们可得到简化 Jacobi-Davidson 方法的局部三次收敛性. 这明显改进了目前已有的结果, 已有结果中仅仅给出了非精确简化 Jacobi-Davidson 方法的局部线性收敛性, 且仅能导出内迭代修正方程求解精度设为零时的局部二次收敛性. 数值算例验证了理论结果的有效性.

其次, 假设初始近似向量足够接近目标特征向量, 我们论证了当内迭代修正方程用 Krylov 子空间方法求解时, 非精确简化 Jacobi-Davidson 方法的局部二次收敛性, 同时这也导出了内迭代修正方程的求解精度达到当前近似向量残量范数的常数倍时非精确简化 Jacobi-Davidson 方法的局部三次收敛性. 这些收敛性结果对 Hermitian 矩阵的内部特征值同样成立. 因此, 我们把端部特征值的收敛性结果推广到内部特征值上.

再次, 利用 Chebyshev 多项式, 我们构造了一种具有三项递推关系的多项式滤子. 这种多项式滤子在加速收敛的同时不需要求解大规模线性方程组而仅仅执行矩阵与向量的乘积, 同时三项递推关系式的存在使得该滤子在 CPU 和内存方面较占优势. 作为应用, 我们把该多项式滤子应用到 Davidson 方法中并提出了滤化 Davidson 方法. 通过选取恰当的位移, 滤化 Davidson 方法具有局部三次收敛速率. 数值算例验证了该滤子技术的有效性.

最后, 我们提出了求解 Hermitian 矩阵最小特征值和相应特征向量的扩展 Krylov 子空间迭代方法, 并给出了该方法的局部和全局收敛性分析. 收敛性结果给出了扩展 Krylov 子空间方法中参数对收敛性质的影响. 另外, 由于精确求解该方法中的大规模线性方程组是极其困难的, 我们给出了扩展 Krylov 子空间方法的非精确实现及预处理策略. 数值算例表明了该方法的高效性.

关键字: Hermitian 特征值问题, Rayleigh-Ritz 方法, Jacobi-Davidson 方法,子空间方法