特征值问题的自适应算法与代数解法器的研究

洪琪琛

摘　要

工程计算、材料科学、数据科学等领域经常需要求解特征值问题. 特征值问题越来越受到学者们的关注, 不仅因为它是科学计算和工程计算的重要数学工具, 也因为它往往能揭示一些物理现象的本质. 有限元方法是被广泛应用于求解微分算子特征值问题的离散方法之一. 自适应有限元方法能自动判别和加密误差相对大的单元, 从而产生一系列最优网格剖分.

受多重校正方法的启发, 本文提出两类求解特征值问题的自适应算法. 这两类算法的共同点是, 它们都只需要在加密得到的一系列网格上计算与特征值问题相应的线性边值问题, 以及在低维空间内求解小规模特征值问题. 由于并不需要在细网格上进行特征值求解, 从而节省了大量的计算量, 因此它们的效率可以达到在细网格上求解相应的线性边值问题的效率. 第一个自适应算法相较于第二个更容易实现. 但后者比前者有更多的自我调节能力, 并且前者对初始网格尺寸的要求也要更严格. 除此之外, 这两类方法的收敛性和最优复杂度都得到了理论上的证明和数值算例的验证.

本文还将介绍一个自主开发的代数特征值解法器 — PASE (Parallel Auxiliary Space Eigensolver). PASE 采用的算法基于一类求解代数特征值问题的多重校正方法, 这也将在文中介绍. 同时, 我们将简单介绍 PASE 的一些编程框架和准则. 最后, 通过测试模型问题, 我们将 PASE 与 HYPRE 软件包的 LOBPCG 方法以及 SLEPc 软件包的 Krylov-Schur 方法进行比较, 来展示 PASE 的计算效率和并行可扩展性.

关键词：特征值问题, 自适应有限元方法, 收敛性, 最优复杂度, 代数多重校正方法, 并行, 辅助空间, 代数特征值解法器