特征值问题与高效多重网格方法的一些研究

张宁

摘要

现代科学研究与工程计算中的很多模型都可以表达成相应的数学问题，科学与工程计算研究的内容主要是求解这些重要的数学问题. 特征值问题是科学与工程计算中的一类重要问题，在电子结构、结构力学与数据科学等领域都有着广泛的应用. 有限元方法是求解偏微分方程的一类重要的工具，同时多重网格方法是一种重要的高效数值求解算法. 本文主要研究特征值问题的高效求解方法，代数特征值问题稳定高效的解法器以及多重网格方法和多重校正技术在非线性问题中的一些应用.

对线性特征值问题，本文将介绍一个自主开发的代数特征值解法器—GCGE(Generalized Conjugate Gradient Eigensolver). GCGE 基于阻尼块反幂法，并采用了一系列的优化方法，使得该解法器可以用于计算具有复杂几何结构、模态密集、大量模态计算、超大计算规模等复杂应用特征的特征值问题. 经过测试，GCGE 与目前主流的特征值解法器相比具有明显的优势，有更好的稳定性和计算效率. 本文还给出了求解特征值问题的一种并行辅助子空间方法，这种方法将细空间上的特征值问题转化为相应的线性边值问题和非常低维的特征值问题，因为相应于不同特征值的边值问题和低维特征值问题是互相独立的，且不需要信息交换，所以可以并行地求解，且不需要在高维空间进行正交化，因此该方法具有良好的并行可拓展性. 本文对提出的算法进行了相应的理论分析，并用数值实验验证了算法的有效性和理论结果.

Gross-Pitaevskii 方程(GPE)是描述 Bose-Einstein 凝聚(BEC)性质的一类非线性特征值问题. 基于有限元方法和多重校正技术，可以给出求解 GPE 的多重网格方法. 这种方法将需要超线性计算量的非线性特征值问题转化为同等规模只需线性计算量的线性边值问题与超小规模的非线性特征值问题的组合，且可以达到最优的收敛速度. 本文对该多重网格方法进行了高效的实现，对小规模非线性特征值问题在非线性迭代中的计算进行统一，使问题的渐近计算量不再依赖于非线性迭代的次数，从而使得算法的渐近计算量达到绝对最优. 本文还给出了半线性抛物方程的多重网格方法，并对该多重网格方法进行高效的实现，使半线性抛物问题的渐近计算量可以不再依赖于问题的非线性强弱.

关键词：有限元方法，特征值问题，多重网格方法，并行计算，特征值解法器