实用的大规模特征值问题求解算法

陈阳

摘要

特征值问题在科学与工程计算中具有广泛的应用。微分算子特征值问题是科学与工程计算中典型的数学模型，谱聚类方法与主成分分析算法是机器学习的重要算法，这些都会导出大规模特征值问题的求解。本文围绕设计与分析实用的大规模特征值问题求解算法这一课题进行了相关研究。在所有特征值问题求解算法中，反幂法(inverse iteration) 具有很好的理论收敛结果。但是，据我们所知，反幂法在实际应用中很难达到理论收敛率。本文重点研究了反幂法，包括实用反幂法的算法设计、理论分析和程序设计。首先，我们从误差估计、算法过程和收敛性分析三个方面回顾了反幂法和Rayleigh 商迭代法(Rayleigh quotient iteration) 的已有理论结果。同时，针对反幂法，我们给出余量的收敛速度定理；针对Rayleigh 商迭代法，我们给出余量的收敛速度定理以及新的局部收敛定理。其次，我们分析了影响算法实际效果的重要问题——极端病态的线性方程组的求解。为此，我们引入了我们课题组发展的求解近似奇异线性方程组的解法器以求解特征值问题解法器中的线性方程组，并提出了自适应选取线性求解器的思想。结合这些线性方程组解法器与已有的反幂法和Rayleigh 商迭代法，我们得到实用反幂法和实用Rayleigh 商迭代法。最后，我们进行了数值实验。数值结果表明，实用反幂法可以实现线性收敛，而实用Rayleigh 商迭代法可以达到平方收敛，这与理论结果吻合。

关键词：大规模特征值问题，反幂法，Rayleigh 商迭代法，局部收敛性，余量收敛速度，线性方程组求解器，实用算法，线性收敛，平方收敛