

中图分类号 O241.6
学科分类号 070102

论文编号: 1028708 10-0021

硕士学位论文

求解广义对称特征值问题的块 Jacobi-Davidson 方法

研究生姓名	高 雄
学科、专业	计算数学
研究 方 向	科学与工程计算及其软件
指 导 教 师	戴华教授

南京航空航天大学

研究生院 理学院

二〇一〇年二月



Nanjing University of Aeronautics and Astronautics
The Graduate School
College of Science

Block Jacobi-Davidson Method for Solving Generalized Symmetric Eigenvalue Problems

A Thesis in
Computational Mathematics

by
Gao Xiong

Advised by
Professor Dai Hua

Submitted in Partial Fulfillment
of the Requirements
for the Degree of
Master of Science

February, 2010

承诺书

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

本人授权南京航空航天大学可以有权保留送交论文的复印件，允许论文被查阅和借阅，可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存论文。

(保密的学位论文在解密后适用本承诺书)

作者签名： 高 雄
日 期： 2010年3月19日

摘 要

Jacobi-Davidson方法是求解广义对称特征值问题极端特征对的一种有效方法。本文将其进行块推广并对其使用调和策略,提出了调和块Jacobi-Davidson方法,新方法可以有效计算广义对称特征值问题的重或密集内部特征值。为了有效求解校正向量,对块Jacobi-Davidson方法的校正方程进行了预处理。另外,为了减少块Jacobi-Davidson方法的计算量与存储量,本文还给出了块Jacobi-Davidson方法的重新开始及收缩技术。数值实验表明:块Jacobi-Davidson方法对于计算重或密集极端特征值是有效的,调和块Jacobi-Davidson方法对于计算谱内部特征值是有效的。

关键词: 广义对称特征值问题, Jacobi-Davidson 方法, 预处理, 调和方法, 重新开始及收缩

Abstract

Jacobi-Davidson method is very efficient for computing the extreme eigenpairs of the generalized symmetric eigenproblems. This paper presents the block version of the method and applies the harmonic strategy to the block Jacobi-Davidson method, then derives the harmonic block Jacobi-Davidson method by which the multiple or clustered interior eigenvalues of the generalized symmetric eigenproblems can be computed efficiently. To approximate the correction vectors efficiently, the preconditioning technique of the correction equation is considered. Moreover, in order to reduce the computational cost and storage of the method, the restarting and deflation techniques are discussed. Numerical experiments show that the block Jacobi-Davidson method is efficient for computing the multiple or clustered extreme eigenpairs and the harmonic block Jacobi-Davidson method is efficient for computing the interior eigenpairs of the generalized symmetric eigenproblems.

Key words: generalized symmetric eigenproblems; block Jacobi-Davidson method; harmonic method; preconditioning; restarting and deflation

目 录

第一章 绪论	1
1.1 背景介绍	1
1.2 记号和约定	3
1.3 正交投影方法的理论知识	3
第二章 Jacobi-Davidson 方法及其块推广	6
2.1 标准特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法	6
2.2 广义对称特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法	7
2.3 广义对称特征值问题的块 Jacobi-Davidson 方法	9
第三章 块 Jacobi-Davidson 方法的调和策略与预处理技术	11
3.1 调和块 Jacobi-Davidson 方法	11
3.2 调和块 Jacobi-Davidson 方法的预处理技术	12
第四章 块 Jacobi-Davidson 方法的重新开始与收缩技术	17
4.1 块 Jacobi-Davidson 方法的收缩技术	17
4.2 动态稠密重新开始块 Jacobi-Davidson 方法	18
第五章 数值实验	21
5.1 校正方程中 $A - \mathcal{Q}_i B$ 的合理选取	21
5.2 Jacobi-Davidson 方法和块 Jacobi-Davidson 方法的比较	22
5.3 块 Jacobi-Davidson 方法使用不同预处理算子及调和策略的比较	23
5.4 调和块 Jacobi-Davidson 方法的动态重新开始及收缩技术的应用	27
第六章 结论	29
参考文献	30
致 谢	33
在学期间的研究成果及发表的学术论文	34

图表清单

图 5.1 JD 方法	23
图 5.2 BJD 方法	23
图 5.3 三对角预处理 BJD 方法	26
图 5.4 五对角预处理 BJD 方法	26
图 5.5 三对角预处理 HBJD 方法	26
图 5.6 五对角预处理 HBJD 方法	26
表 5.1 不同 $A - \mathcal{Q}_i B$ 对应的 BJD 方法的数值结果	21
表 5.2 JD 方法与 BJD 方法的数值结果	22
表 5.3 使用不同预处理矩阵策略的 BJD 方法的数值结果	24
表 5.4 使用三对角预处理的计算结果	25
表 5.5 使用五对角预处理的计算结果	25
表 5.6 BJD 方法与 HBJD 方法的比较	27
表 5.7 DBJD 方法与 DHBJD 方法的比较	28

第一章 绪论

1.1 背景介绍

矩阵特征值问题是数值代数领域的一个基本课题之一, 其研究具有重要的理论意义和应用价值。从数学角度来看, 矩阵特征值问题大多来自数学物理方程、差分方程、Markov 过程等; 从工程应用角度来看, 机械、航空、航天、建筑、电子等大型结构的动力分析或稳定性分析都涉及求解大规模矩阵特征值问题。

设 A 为 n 阶实(或复)矩阵, 所谓特征值问题就是求复数 λ 和非零向量 x , 使得 $Ax = \lambda x$ 。通常称 λ 为 A 的特征值, x 为 A 对应于特征值 λ 的特征向量。对于计算 λ 和 x , 一个最直接的方法是先求特征方程 $\det(\lambda I - A) = 0$ 的根即特征值 λ , 再将其回代到方程 $Ax = \lambda x$ 中求相应的特征向量。但在实际应用中, 除一些特殊矩阵外, 该方法对一般矩阵不可行。首先, 若矩阵 A 的阶数较大, 则计算特征多项式 $\det(\lambda I - A)$ 的计算量非常大; 其次, 特征方程 $\det(\lambda I - A) = 0$ 的根通常是不稳定的, 即特征方程系数的微小扰动将导致方程根的较大误差。因此, 人们一直研究特征值问题的数值解法, 经过一百多年的探索, 人们提出了许多方法, 促进了该领域的不断发展。

目前, 求解大型矩阵特征值问题的方法主要分为两类: 变换方法和投影方法。变换方法利用了矩阵特征值的相似不变性原理, 直接对原矩阵进行处理, 通过一系列变换(如 Householder 变换, Givens 变换等), 将其转化为一个容易求解的特殊矩阵(如 Hessenberg 矩阵, 三角形矩阵, 拟三角形矩阵等), 然后通过 Jacobi 方法, QR 方法等求解。变换方法收敛速度快, 计算结果精确可靠, 但也存在一些不足, 如变换方法存储量较大, 且一般的变换方法会破坏矩阵的稀疏性。因此, 变换方法只适宜求解阶数较低的稠密矩阵特征值问题。投影方法是通过投影算子把阶数较高的矩阵特征值问题投影到低维子空间中, 将大规模矩阵特征值问题转化为中、小型矩阵特征值问题, 然后采用变换方法计算其特征对作为原矩阵特征对的近似。由于投影方法可采用压缩存储技术, 因而它是目前求解大型稀疏矩阵特征值问题的一类常用方法。对于大型稀疏对称矩阵, 目前常用的投影方法有子空间迭代法、Lanczos 方法、Arnoldi 方法等。子空间迭代法可同时求解几个极端特征值和相应的特征向量, 但它收敛速度较慢, 运算量较大。Lanczos 方法利用三项递推产生 Lanczos 向量, 并将矩阵 A 投影为低阶三对角矩阵, 然后求解低阶三对角矩阵特征值问题, 用 Ritz 对逼近矩阵 A 的特征对。该方法存储量较小, 计算速度较快, 但是 Lanczos 向量之间容易失去正交性, 通常需要使用一些重正交化技术。

1975 年, Davidson[1]在计算量子化学中的特征值问题时提出了计算大型对称矩阵极端特征值问题的一种新方法—Davidson 方法。最初, Davidson 方法是通过摄动方法得到的, 其主要思

想是用一个包含特征方向更多信息的向量扩充搜索子空间从而提高逼近效果。大量的数值试验表明, Davidson 方法对于求解对角占优矩阵的特征值问题是非常有效的。后来许多学者对 Davidson 方法进行了研究和改进[2-6], 如 Crouzeix 等人[5]将 Davidson 方法推广到了块形式, 并给出了 Davidson 方法的收敛性分析。Davidson 方法已发展成为求解对角占优 Hermitian 矩阵若干个最小或最大特征值的有效方法。然而, 对非对角占优 Hermitian 矩阵, Davidson 方法的计算效果不尽如人意, 而且精度很高的预条件子可能会导致收敛速度减慢甚至停滞。

1996 年, Sleijpen 和 Van der Vorst[7]将 Jacobi 方法的校正思想和 Davidson 方法的内外迭代思想相结合, 提出了 Jacobi-Davidson 方法: 首先在近似特征向量的正交补空间上求解校正方程, 然后用求得的校正向量扩充搜索子空间, 最后在搜索子空间中计算 Ritz 对作为所求特征对的近似。Jacobi-Davidson 方法的关键是校正方程的有效求解, 其良好的收敛性质使得校正方程只需少数迭代与适当的计算精度即可。另外, 通过投影得到的校正向量可以避免 Davidson 方法中可能的停滞, 且 Jacobi-Davidson 方法允许应用高精度的预条件子。目前, Jacobi-Davidson 方法被认为是计算特征值问题的最有效方法之一, 特别是这一方法对于计算中间特征值有优势。另外, Jacobi-Davidson 方法还具有较好的稳定性, 对于非对角占优、非正规矩阵也可能达到较快的收敛速度。许多学者对 Jacobi-Davidson 方法进行了研究和改进, 如 Sleijpen 等人[8,9]将其应用到广义特征值问题以及多项式特征值问题。Van den Eshof[10]讨论在对称情况下 Jacobi-Davidson 方法的收敛性问题。Notay[11]将共轭梯度方法与 Jacobi-Davidson 方法有效结合, 利用共轭梯度法求解校正方程, 并且根据共轭梯度法的性质建立了内部线性系统残量与外部过程收敛性的关系。此外, 戴小英等[12]讨论了在 Jacobi-Davidson 方法中采用区域分解和多水平技术产生校正方程的预条件子。当所求的特征值分布密集或矩阵阶数很高时, 投影子空间的维数可能较大, 从而 Jacobi-Davidson 方法需要的计算量及存储量很大。为解决这个问题, 一些学者研究了 Davidson 方法和 Jacobi-Davidson 方法的重新开始技术, 如隐式重新开始技术[13]、动态稠密重新开始技术[14]、组合 CG 递归与动态稠密重新开始技术[15]等。

文献[8,9]将 Jacobi-Davidson 方法应用于广义特征值问题 $Ax = \lambda Bx$, 其中矩阵 A , B 是给定的 $n \times n$ 矩阵, 且假定 B 正定, 并分析了如何使用合理而又有效的投影方法将原来阶数较高的特征值问题转化为阶数较低的特征值问题, 以及如何正确选取测试子空间和搜索子空间, 此外还分析了如何对校正方程进行合理的预处理以及如何构造增广校正方程等问题。数值结果表明, Jacobi-Davidson 方法是求解广义特征值问题的有效方法之一。然而, 当要求的特征值是重或密集特征值时, Jacobi-Davidson 方法的有效性和可靠性会大大降低, 并且当所求特征值是谱内部特征值时, Jacobi-Davidson 方法的收敛性常常表现得没有规律, 有时还会出现“假”特征值。为解决 Jacobi-Davidson 方法计算重或密集特征值有效性和可靠性低的问题, 本文研究广义对称特征值问题 Jacobi-Davidson 方法的块格式, 提出求解广义对称特征值问题的块 Jacobi-Davidson

方法。为了应用块 Jacobi-Davidson 方法有效计算广义对称特征值问题的内特征值, 结合调和策略[16-19], 提出了求解广义对称特征值问题的调和块 Jacobi-Davidson 方法。

全文安排如下: 第一章概述文章研究背景以及正交投影方法的理论知识; 第二章讨论了标准特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法以及广义对称特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法并对其进行块推广; 第三章讨论了块 Jacobi-Davidson 方法的调和策略与预处理技术; 第四章研究了块 Jacobi-Davidson 方法的重新开始与收缩技术; 第五章给出数值实验; 第六章对本文进行总结和展望。

1.2 记号和约定

本文用 R^n 表示 n 维实向量空间, $SR^{n \times n}$ 表示 $n \times n$ 实对称矩阵的全体, 用大写字母表示矩阵或者是线性算子, 小写字母表示向量。

I_n 表示 n 阶单位矩阵, 若不产生混淆, 用 I 表示。

设 $A \in SR^{n \times n}$, $B \in SR^{n \times n}$, 称 A 和 B 为广义对称特征值问题 $Ax = \lambda Bx$ 的矩阵束, 记为 (A, B) 。 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 表示矩阵束 (A, B) 的特征值, x_1, x_2, \dots, x_n 表示相应正交规范特征向量(通常意义下的正交规范), 且满足 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ 。 $Ax = \lambda Bx$ 的特征对表示为 (λ, x) , 其中 λ 为特征值, x 为相应的特征向量。

本文涉及的特征向量均为正交规范特征向量, 所给的范数若没有特别声明均为 2-范数。

x^T 和 X^T 分别表示向量 x 和矩阵 X 的转置。

列正交规范矩阵 $V \in R^{n \times m}$ 是指满足 $V^T V = I_m$ 的矩阵。

MGS 表示 Modified Gram-Schmidt 正交化过程。

$x \perp y$ 表示向量 x 和 y 正交, $x \perp U \in R^{n \times m}$ 表示向量 x 和 U 的列所张成的子空间正交。

如果 v_1, v_2, \dots, v_m 是 m 个 n 维向量, 那么 $V = [v_1, v_2, \dots, v_m]$ 表示 $n \times m$ 矩阵, 其中 v_i 为 V 的第 i 列。 $span(V)$ 表示由 V 的列所张成的子空间。 $span(V)^T$ 表示子空间 $span(V)$ 的正交补。

1.3 正交投影方法的理论知识

考虑如下标准特征值问题

$$Ax = \lambda x, \quad (1.1)$$

其中 A 是 $R^{n \times n}$ 中的一个对称矩阵, 令 $V_m = [v_1, v_2, \dots, v_m]$ 是 n 维空间中的 m 个线性无关的向量组成的 $n \times m$ 矩阵, $E_m = span(V_m)$ 是由 v_1, v_2, \dots, v_m 所张成的子空间。对子空间 E_m 的正交投影方法就是寻求问题(1.1)的近似特征值 $\lambda^{(m)}$ 和近似特征向量 $\varphi^{(m)}$, 满足

$$\begin{cases} \varphi^{(m)} \in E_m \\ A\varphi^{(m)} - \lambda^{(m)}\varphi^{(m)} \perp E_m \end{cases} \quad (1.2)$$

记 $\varphi^{(m)} = V_m y^{(m)}$, 其中 $y^{(m)}$ 是一个 m 维列向量, 则(1.2)可改写为

$$(B_m - \lambda^{(m)} C_m) y^{(m)} = 0, \quad (1.3)$$

其中 $B_m = V_m^T A V_m$, $C_m = V_m^T V_m$. 可见 $\lambda^{(m)}$ 和 $y^{(m)}$ 是广义特征值问题(1.3)的特征值和特征向量。

若 V_m 是列正交规范矩阵, 则问题(1.3)可转化为

$$(V_m^T A V_m - \lambda^{(m)} I) y^{(m)} = 0. \quad (1.4)$$

若 π_m 表示子空间 E_m 上的正交投影算子, 则(1.2)可写成

$$\pi_m (A - \lambda^{(m)} I) \varphi^{(m)} = 0. \quad (1.5)$$

我们称问题(1.2), (1.3), (1.5)为(1.1)的近似问题, 近似问题的所有解 $\lambda^{(m)}$ 称为矩阵 A 对子空间 E_m 的 Ritz 值, 相应于 $\lambda^{(m)}$ 的向量 $\varphi^{(m)}$ 称为 Ritz 向量。

为了便于理论分析, 我们引入线性算子 $A_m = \pi_m A \pi_m$. 若 V_m 是 E_m 的一组规范正交基, 则矩阵 A 相对于基 V_m 的矩阵表示是 $V_m^T A V_m$. 因为 $\pi_m \varphi^{(m)} = \varphi^{(m)}$, 于是有如下定理。

定理 1.1 [20] 子空间 E_m 中的 Ritz 值 $\lambda^{(m)}$ 和 Ritz 向量 $\varphi^{(m)}$ 分别是 A_m 的特征值和特征向量。

应用正交投影反方法求得的 Ritz 值 $\lambda^{(m)}$ 和 Ritz 向量 $\varphi^{(m)}$ 是否收敛到特征值问题(1.1)的特征值 λ 和特征向量 x ? 事实上, 当 $m = n$ 时, Ritz 值 $\lambda^{(m)}$ 和 Ritz 向量 $\varphi^{(m)}$ 就是特征值问题(1.1)的特征值和特征向量。当 $m \neq n$ 时, 如果 A_m 的特征值 $\lambda^{(m)}$ 和相应的特征向量 $\varphi^{(m)}$ 接近 A 的特征值 λ 和特征向量 x , 则残量 $(A - \lambda^{(m)} I) \varphi^{(m)}$ 是小量。

关于 $\|(A_m - \lambda I)x\|$, 有如下估计式。

定理 1.2 [20] 令 $\gamma_m = \|\pi_m A(I - \pi_m)\|$, 则

$$\|(A_m - \lambda I)x\| \leq \sqrt{|\lambda|^2 + \gamma_m^2} \|(I - \pi_m)x\|. \quad (1.6)$$

由定理 1.2 可见, 特征向量 x 与子空间 E_m 之间的距离 $\|(I - \pi_m)x\|$ 是一个非常重要的量, 通常 $\|(I - \pi_m)x\|$ 不是小量, 当且仅当 $m = n$ 时, $\|(I - \pi_m)x\| = 0$. 而当 $m < n$ 时, $I - \pi_m$ 是一个正交投影算子, $\|(I - \pi_m)x\|$ 并不随 m 的增大而必然减小。但是如果子空间 E_m 比较特殊, 可以保证 $\|(I - \pi_m)x\|$ 随着 m 的增大而迅速减小。

定义 1.1 [21] 对 n 阶实对称矩阵 A , $n \times m$ 列正交规范矩阵 Q , 令 $H = Q^T A Q$, 假设 H 的某一特征对为 $(\lambda^{(m)}, y^{(m)})$, 则称 $\lambda^{(m)}$ 为矩阵 A 在子空间 $S = \text{span}(Q)$ 上的 Ritz 值, 简称 Ritz 值, 称 $\varphi^{(m)} = Q y^{(m)}$ 为相应的 Ritz 向量。用 $\lambda^{(m)}$ 和 $\varphi^{(m)}$ 来逼近矩阵 A 的特征值和特征向量, 称此逼近过程为 Rayleigh-Ritz 逼近过程。

事实上, 正交投影方法就是 Rayleigh-Ritz 逼近过程的应用。

另外, 假设子空间 S 是 A 的一个 m 维不变子空间, Q 是由 S 的正交规范基为列构成的 $n \times m$ 矩阵, 则必有 $m \times m$ 矩阵 H , 使得

$$R = AQ - QH = 0. \quad (1.7)$$

显然, 矩阵 H 是矩阵 A 对 S 限制算子的矩阵表示, 并且矩阵 H 的特征值都是矩阵 A 的特征值。

若子空间 S 不是矩阵 A 的不变子空间, 则对于 $R(B) = AQ - QB$ 中矩阵 B 和 A 的特征值之间的关系, 有下面的定理。

定理 1.3 [22] 设 Q 由 m 个 n 维正交规范向量组成, B 为 $m \times m$ 对称矩阵, 记 $R(B) = AQ - QB$ 。若 A 的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, B 的特征值为 $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_m$, 则可以找到 m 个不同的自然数 i_1, i_2, \dots, i_m , 使得

$$|\lambda_{i_k} - \mu_k| \leq \|R(B)\|, \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (1.8)$$

定理 1.3 说明了矩阵 B 和 A 的特征值之间的关系, 只要 $\|R(B)\|$ 充分小, 则矩阵 B 的特征值就可以作为 A 的特征值的较好近似。显然, $\|R(B)\|$ 的大小与矩阵 B 的选取紧密相关。下面的定理给出了当矩阵 B 取何值时, $\|R(B)\|$ 取得最小。

定理 1.4 [22] 假设矩阵 Q 和 B 满足定理 1.3 的条件, 记

$$R(B) = AQ - QB, \quad H = Q^T AQ,$$

则

$$\|R(H)\| \leq \|R(B)\|.$$

对形如 $AQ - QB$ 的矩阵, 只有当 $B = Q^T AQ$ 时, $AQ - QB$ 的范数才达到最小。因此, 正交投影方法是一种最佳逼近, 在求解特征值问题时, 若采用子空间方法进行逼近, 一般都会采用此方法。

第二章 Jacobi-Davidson 方法及其块推广

本章讨论标准和广义特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法。为了有效计算广义对称特征值问题的重或密集特征值, 文章提出求解广义对称特征值问题的块 Jacobi-Davidson 方法。

2.1 标准特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法

1975 年, Davidson [1] 在计算量子化学中的特征值问题时提出了计算大型稀疏对称矩阵极端特征值问题的一种新方法—Davidson 方法, 该方法是 Rayleigh-Ritz 过程和预处理过程的有效结合, 其中对于预处理矩阵和重新开始向量的合理选取非常重要。最初, Davidson 方法是通过摄动方法得到的, 其主要思想是用一个包含特征方向更多信息的向量扩充搜索子空间从而提高逼近效果。若 Davidson 方法没有预处理, 则它与 Lanczos 方法等价。大量数值试验表明, 对于对角占优矩阵, Davidson 方法的收敛性优于 Lanczos 方法, 因为 Davidson 方法能够使得不需要的特征向量的分量从所求近似特征子空间的基中逐渐减小, 从而提高方法的收敛性; 而对于非对角占优矩阵, Davidson 方法的计算效果并不明显, 且精度很高的预条件子常会导致收敛速度减慢甚至停滞。Sleijpen 和 Van der Vorst [7] 于 1996 年将 Jacobi 方法的校正思想和 Davidson 方法的内外迭代思想相结合, 提出了 Jacobi-Davidson 方法, 该方法求解特征值问题的关键是校正方程的有效求解, 其良好的收敛性质使得校正方程只需少数迭代与适当精度即可。另外, 由投影得到的校正向量可以避免 Davidson 方法中可能出现的停滞, Jacobi-Davidson 方法还允许应用高精度的预条件子。

对于标准特征值问题 $Ax = \lambda x$, 将其投影到以标准正交基 v_1, v_2, \dots, v_k 张成的子空间 $\text{span}(v_1, v_2, \dots, v_k)$ 上, 用矩阵 A 在该子空间上的 Ritz 对作为所求特征对的近似。记 (\mathcal{G}_k, s_k) 是投影矩阵的特征对, $V_k = [v_1, v_2, \dots, v_k]$, 则矩阵 A 在子空间 $\text{span}(v_1, v_2, \dots, v_k)$ 上的 Ritz 对 (\mathcal{G}_k, u_k) 满足 Ritz-Galerkin 条件

$$\begin{cases} (Au_k - \mathcal{G}_k u_k) \perp \text{span}(v_1, v_2, \dots, v_k), \\ u_k = V_k s_k \end{cases},$$

即 $V_k^T A V_k s_k - \mathcal{G}_k s_k = 0$ 。

假设矩阵 A 在子空间 $\text{span}(u_k)^\perp$ 上的投影矩阵为 $\tilde{A} = (I - u_k u_k^T) A (I - u_k u_k^T)$, 即

$$A = \tilde{A} + u_k u_k^T A + A u_k u_k^T - \mathcal{G}_k u_k u_k^T. \quad (2.1)$$

为了对 Ritz 向量 u_k 进行合理校正, 假设在子空间 $\text{span}(u_k)^\perp$ 中求得 u_k 的校正向量 t_k , 满足

$$\begin{cases} A(u_k + t_k) = \lambda(u_k + t_k) \\ t_k \perp u_k \end{cases}. \quad (2.2)$$

将(2.2)式带入(2.1)式可得

$$(\tilde{A} - \lambda I)t_k = -r_k + (\lambda - \vartheta_k - u_k^T A u_k)u_k,$$

其中 $r_k = (A - \vartheta_k I)u_k$, 则

$$u_k^T (\tilde{A} - \lambda I)t_k = -u_k^T r_k + (\lambda - \vartheta_k - u_k^T A u_k)u_k^T u_k.$$

由向量 r_k 和 t_k 与 u_k 的正交性可得 $\lambda - \vartheta_k - u_k^T A u_k = 0$, 所以

$$(\tilde{A} - \lambda I)t_k = -r_k.$$

因为所求特征值 λ 未知, 计算过程中用 Ritz 值 ϑ_k 代替 λ 。由 $\tilde{A} = (I - u_k u_k^T)A(I - u_k u_k^T)$ 及 $t_k = (I - u_k u_k^T)t_k$ 可得 Jacobi-Davidson 方法的校正方程

$$\begin{cases} (I - u_k u_k^T)(A - \vartheta_k I)(I - u_k u_k^T)t_k = -r_k \\ t_k \perp u_k \end{cases}.$$

由上述过程可得求解标准特征值问题的 Jacobi-Davidson 算法。

算法 2.1 标准特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法

1) 选取最大迭代次数 m , 允许误差 tol , 正交规范向量 v , 令 $V_1 = [v]$, $u = v$;

2) 对 $k=1, 2, \dots, m-1$, 执行

2.1) 计算 $H_1 = V_1^T A V_1$, $\vartheta = u^T A u$, $r = Au - \vartheta u$;

2.2) 求解校正方程

$$\begin{cases} (I - uu^T)(A - \vartheta I)(I - uu^T)z = -r \\ z \perp u \end{cases};$$

2.3) 由校正向量 z , 通过 MGS 正交化过程将搜索子空间 V_k 扩充至 V_{k+1} ;

2.4) 计算 $H_{k+1} = V_{k+1}^T A V_{k+1}$ 的特征对 (ϑ, y) , 其中 y 满足 $\|y\|_2 = 1$;

2.5) 计算 Ritz 向量 $u = V_{k+1}y$, 相应残量 $r = Au - \vartheta u$;

2.6) 检测收敛性, 若收敛则算法停止, 否则 $k = k+1$;

3) 重新开始: 记 $V_1 = [u]$, 返回 2);

若对最大迭代次数 m 不加限制, 则算法至多迭代 n 次便可得到矩阵 A 的特征值, 因为当 $m = n$ 时, 矩阵 $H_n = V_n^T A V_n$ 与矩阵 A 相似, 从而矩阵 H_n 与矩阵 A 特征值相同。但实际计算时, 由于计算量与存储量的限制, 算法 2.1 需采用重新开始策略, 通常 $m \ll n$ (一般取 m 为所求特征值个数的 4-9 倍), 即当迭代步数达到最大值 m 时, 用近似 Ritz 向量作为新的初始迭代向量, 返回 2)。

2.2 广义对称特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法

考虑广义对称特征值问题

$$Ax = \lambda Bx, \quad (2.3)$$

其中矩阵 A , B 为给定的 $n \times n$ 对称矩阵, 且假定矩阵 B 正定. 假设 (\mathcal{G}, u) 是(2.3)式某个特征对 (λ, x) 的近似, 则由 Ritz-Galerkin 条件可得

$$r \equiv Au - \mathcal{G}Bu \perp u.$$

与标准特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法推导过程类似, 在子空间 $\text{span}(u)^\perp$ 中求 u 的校正向量 z , 满足条件

$$A(u+z) = \lambda B(u+z). \quad (2.4)$$

对(2.4)式两边同时作用向量 u 以及投影矩阵 $I - uu^T$, 可得

$$\begin{cases} \lambda = \frac{u^T A(u+z)}{u^T B(u+z)} \\ (I - uu^T)(A - \lambda B)z = -(a - \lambda b), \text{ 且 } z \perp u \end{cases}, \quad (2.5)$$

$$\text{其中 } \alpha = \frac{u^T Au}{u^T u}, \quad a = Au - \alpha u, \quad \beta = \frac{u^T Bu}{u^T u}, \quad b = Bu - \beta u, \quad \mathcal{G} = \frac{\alpha}{\beta}, \quad r = a - \mathcal{G}b.$$

对于(2.5)式中第二式, 由于所求特征值 λ 未知, 计算过程中用近似特征值 \mathcal{G} 代替 λ . 由 $z \perp u$ 可得 $z = (I - uu^T)z$, 所以(2.5)式中第二式可化为

$$(I - uu^T)(A - \mathcal{G}B)(I - uu^T)z = -r. \quad (2.6)$$

校正向量 z 通过 MGS 正交化过程可将投影子空间 V_k 扩充至 V_{k+1} , 然后在投影子空间 V_{k+1} 中求解所求特征对 (λ, x) 的近似.

综上所述, 可得求解广义对称特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法.

算法 2.2 广义对称特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法

- 1) 选取正整数 m , 允许误差 tol , 正交规范向量 v_1 , 记 $V_1 = [v_1]$, $u = v_1$;
- 2) 对 $k=1, 2, \dots, m-1$, 执行

$$2.1) \quad \text{计算 } \theta = \frac{u^T Au}{u^T Bu}, \quad r = Au - \theta Bu;$$

2.2) 求解校正方程

$$(I - uu^T)(A - \theta B)(I - uu^T)z = -r;$$

2.3) 由校正向量 z , 通过 MGS 正交化过程将投影子空间 V_k 扩充至 V_{k+1} ;

2.4) 计算 $V_{k+1}^T A V_{k+1} y - \theta V_{k+1}^T B V_{k+1} y = 0$ 的特征对 (\mathcal{G}, y) , 其中 y 满足 $\|y\|_2 = 1$;

2.5) 计算 Ritz 向量 $u = V_{k+1} y$ 及相应残量 $r = Au - \mathcal{G}Bu$;

2.6) 检测收敛性, 若收敛则算法停止, 否则 $k = k+1$;

- 3) 重新开始: 记 $V_1 = [u]$, 返回 2);

2.3 广义对称特征值问题的块 Jacobi-Davidson 方法

在对 Jacobi-Davidson 方法的研究中发现当所求特征值为重或密集特征值时, Jacobi-Davidson 方法的有效性会降低, 可能出现下列情形,

- 1) 当近似特征对 (\mathcal{G}, u) 与所求特征对 (λ, x) 接近时, 校正方程的系数矩阵可能变得病态。
- 2) 对于重特征值问题, Jacobi-Davidson 方法只能有效求解部分特征对。
- 3) 校正方程的系数矩阵可能奇异, 使得算法的收敛速度变慢, 甚至出现较大偏差。
- 4) 对于矩阵良态, 且其密集特征值也良态, 采用块方法可达到较高的收敛性[21]。

基于上述原因, 下面导出广义对称特征值问题的块 Jacobi-Davidson 方法。

对于广义对称特征值问题(2.3), 假设特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, 且 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$, 相应的正交规范特征向量(通常意义下的正交规范)为 x_1, x_2, \dots, x_n 。假设 $(\mathcal{G}_i, u_i)(i=1, 2, \dots, l)$ 是 $Ax = \lambda Bx$ 的 l 个所求特征对的近似, 相应残量分别为 $r_i = Au_i - \mathcal{G}_i Bu_i (i=1, 2, \dots, l)$ 。记 $U = [u_1, \dots, u_l]$, $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_l)$, $R = [r_1, \dots, r_l]$, $\Lambda_1 = \text{diag}(\mathcal{G}_1, \dots, \mathcal{G}_l)$, 则

$$R = AU - BU\Lambda_1,$$

由 Ritz-Galerkin 条件可得

$$R \equiv AU - BU\Lambda_1 \perp U.$$

因为 $(\mathcal{G}_i, u_i)(i=1, 2, \dots, l)$ 是所求特征对的近似, 所以希望求得矩阵 U 的校正 $Z \perp U$ 满足

$$A(U + Z) = B(U + Z)\Lambda. \quad (2.7)$$

用子空间 $\text{span}(U)^\perp$ 上的正交投影矩阵 $I - UU^T$ 对(2.7)式进行投影处理, 可得

$$(I - UU^T)(AZ - BZ\Lambda) = -(I - UU^T)(AU - BU\Lambda). \quad (2.8)$$

由于所求特征值 Λ 未知, 在计算过程中用近似特征值 Λ_1 作为 Λ 的近似, 从而(2.8)式可化为

$$\begin{cases} (I - UU^T)(A - \mathcal{G}_i B)z_i = -r_i & (i=1, 2, \dots, l). \\ z_i \perp U \end{cases} \quad (2.9)$$

又由矩阵 $Z \perp U$, 所以 $z_i = (I - UU^T)z_i$, 则(2.9)式可化为

$$\begin{cases} (I - UU^T)(A - \mathcal{G}_i B)(I - UU^T)z_i = -r_i & (i=1, 2, \dots, l). \\ z_i \perp U \end{cases} \quad (2.10)$$

使用校正向量 $z_i (i=1, 2, \dots, l)$ 可将投影子空间 V_k 扩充至 V_{k+1} , 然后在子空间 V_{k+1} 中计算新的近似特征对 $(x_i, \lambda_i)(i=1, 2, \dots, l)$ 。

综上所述, 可得求解广义对称特征值问题的块 Jacobi-Davidson 方法。

算法 2.3 广义对称特征值问题的块 Jacobi-Davidson 方法

- 1) 选取正整数 m , 允许误差 tol , 目标值 τ , 迭代块大小 p , 列正交规范矩阵 V_1 ;
- 2) 对 $k=1, 2, \dots, m-1$, 执行

2.1) 计算 $V_k^T A V_k y = \mathcal{G} V_k^T B V_k y$ 的 l 个最靠近 τ 的特征对 (\mathcal{G}_i, y_i) ($i = 1, 2, \dots, l$),
并计算 Ritz 向量 $u_i = V_k y_i$ 以及相应残量 $r_i = A u_i - \mathcal{G}_i B u_i$ ($i = 1, 2, \dots, l$);

2.2) 检测收敛性, 若收敛, 则算法停止, 否则进行下一步;

2.3) 求解 l 个校正方程

$$\begin{cases} (I - U U^T)(A - \mathcal{G}_i B)(I - U U^T) z_i = -r_i \\ z_i \perp U \end{cases} \quad (i = 1, 2, \dots, l);$$

2.4) 由校正向量 z_i ($i = 1, 2, \dots, l$), 通过 MGS 正交化过程将 V_k 扩充至 V_{k+1} ;

3) 重新开始: 记 $V_1 = [z_1, z_2, \dots, z_l]$, 返回 2);

迭代块大小 p 可有多种选择, 如果所求特征值为 l 重, 则可取 p 大于或等于 l 。然而, 由于一般 l 事先未知, 因此在实际计算中, p 的大小可以进行动态改变。另外, 校正方程可以使用 MINRES 方法[23]求解。

第三章 块 Jacobi-Davidson 方法的调和策略与预处理技术

在块 Jacobi-Davidson 方法中, 近似特征对的选取对投影子空间的扩张具有重要意义。对于 Petrov-Galerkin 投影方法, 若计算极端特征值, 则 Ritz 值作为所求特征值的近似非常适合, 而计算内部特征值(或者由于舍入误差等原因), 算法的收敛性常常没有规律, 还可能会产生“多余”(spurious)Ritz 值。由块 Jacobi-Davidson 方法的校对方程可以看出, 若近似特征对选取不合适, 则搜索子空间可能得不到有效扩展。调和策略[7,9,13,24]对于内部特征值的求解具有较好性质, 可以有效克服上述问题, 且可避免矩阵求逆及矩阵分解等问题。另外, 校对方程(2.10)是块 Jacobi-Davidson 方法的重要组成部分, 合理的选取预处理算子可以减少块 Jacobi-Davidson 方法的计算量与存储量。

本章首先对块 Jacobi-Davidson 方法使用调和 Petrov-Galerkin 投影方法, 其次, 讨论如何使用预处理算子求解校对方程。

3.1 调和块 Jacobi-Davidson 方法

对于广义对称特征值问题(2.3), 假设求解 l 个靠近给定值 τ (τ 不是矩阵束 (A, B) 的特征值) 的内部特征值 $(\lambda_i, x_i) (i=1, 2, \dots, l)$ 。由(2.3)式可得

$$(A - \tau B)x = (\lambda - \tau)Bx,$$

则

$$(A - \tau B)^{-1}Bx = \frac{1}{\lambda - \tau}x,$$

即靠近给定值 τ 的特征值对应于矩阵 $(A - \tau B)^{-1}B$ 的极端特征值。因为对于标准特征值问题, Rayleigh-Ritz 投影方法对于求解极端特征值效果明显, 所以对矩阵 $(A - \tau B)^{-1}B$ 应用 Rayleigh-Ritz 投影方法, 为避免使用矩阵求逆, 测试子空间取为 $(A - \tau B)V_k$, 则

$$\begin{cases} (A - \tau B)^{-1}Bx - \frac{1}{\lambda - \tau}x \perp (A - \tau B)V_k, \\ x \in V_k \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} V_k^T (A - \tau B)(A - \lambda B)^{-1}BV_k s - \frac{1}{\lambda - \tau}V_k^T (A - \tau B)V_k s = 0, \\ x = V_k s \end{cases}$$

定义 3.1 记 V 是由 k 步块 Jacobi-Davidson 方法产生的 $k \times p$ 维搜索子空间, $v_1, v_2, \dots, v_{k \times p}$ 是

子空间 V 上的一组标准正交基, 记 $V_k = [v_1, v_2, \dots, v_{k \times p}]$, $W_k = (A - \tau B)V_k$, 则 $(\tau + \delta, u)$ 为 (2.3) 式对应于目标值 τ 的调和 Ritz 对当且仅当其满足调和 Petrov-Galerkin 投影条件

$$\begin{cases} (A - \tau B)u - \delta Bu \perp W_k = (A - \tau B)V_k, \\ u \in V_k \end{cases}$$

即满足

$$V_k^T (A - \tau B)(A - \tau B)V_k s = \delta V_k^T (A - \tau B)B V_k s. \quad (3.1)$$

以 $(\tau + \delta, u)$ 作为所求特征对的近似, 其中 $u = V_k s$, 并且 s 是单位向量。相应地, 称 $(\tau + \delta, u)$ 为调和 Ritz 对。

由定义 3.1 可知, 若 (λ, x) 为广义对称特征值问题 (2.3) 的一个特征对, 其中 $x = V_k s$, 则 $(\lambda, V_k s)$ 是一个调和 Ritz 对。因此, 若搜索子空间中包含所求特征向量 x 的近似, 则由调和 Petrov-Galerkin 方法可以求得该近似特征向量。特别地, 对 (3.1) 式两边同时乘以向量 s^T 可得

$$\|(A - \tau B)V_k s\|_2^2 \leq |\delta| \|(A - \tau B)V_k s\|_2 \|B\|_2,$$

即满足 $\|(A - \tau B)V_k s\|_2 \leq |\delta| \|B\|_2$ 。

因此, 在计算中, 若 $\tau \rightarrow \lambda$ 且 $\delta \rightarrow 0$, 则由调和 Petrov-Galerkin 方法不会产生“多余”特征对。

3.2 调和块 Jacobi-Davidson 方法的预处理技术

使用块 Jacobi-Davidson 方法求解广义对称特征值问题 (2.3) 时, 需要求解如下 l 个校正方程

$$(I - UU^T)(A - \mathcal{G}_i B)(I - UU^T)z_i = -r_i, \quad (i = 1, 2, \dots, l)$$

记 $F_p = (I - UU^T)(A - \mathcal{G}_i B)(I - UU^T)$, 则有

$$F_p z_i = -r_i. \quad (i = 1, 2, \dots, l)$$

一般情况下, 以矩阵 $A - \mathcal{G}_i B$ 的近似 K_i 作为校正方程的预处理算子。另外, 为了增加预处理算子的有效性, 需考虑 K_i 的投影。

记 K_i 的投影算子为

$$\hat{K}_i = (I - UU^T)K_i(I - UU^T), \quad (i = 1, 2, \dots, l)$$

下面引理 3.1 说明了如何使用 K_i^{-1} 来表示 \hat{K}_i^{-1} , 其中 \hat{K}_i^{-1} 为 \hat{K}_i 的逆。

引理 3.1 若 K_i 是从 $\text{span}(U)^\perp$ 到 $\text{span}(U)^\perp$ 的映射, 则 \hat{K}_i^{-1} 在 $\text{span}(U)^\perp$ 上存在, 且有

$$\hat{K}_i^{-1} = (I - UU^T)K_i^{-1}(I - UU^T) \quad (i = 1, 2, \dots, l).$$

证明: 若 $y_i \perp \text{span}(U)$, t_i 满足 $K_i t_i = y_i$, 则 $t_i \perp \text{span}(U)$, 且 $\hat{K}_i t_i = y_i$ 。

一般来说,对于非对角预处理算子,投影不可忽略,否则可能导致收敛性降低。

引理 3.2 若 K_i 与 $U^T K_i^{-1} U$ 非奇异,则 \hat{K}_i^{-1} 在 $\text{span}(U)^\perp$ 上存在,且有

$$\hat{K}_i^{-1} = K_i^{-1} (I - U(Y_r^T U)^{-1} Y_r^T) = (I - Y_i(U^T Y_i)^{-1} U^T) K_i^{-1} \quad (i=1,2,\dots,l),$$

其中 Y_r 是方程 $K_i^T Y_r = U$ 的解, Y_i 是方程 $K_i Y_i = U$ 的解。

证明: 由方程 $K_i^T Y_r = U$ 及 $K_i Y_i = U$ 可得

$$U^T Y_i = Y_r^T U \neq 0,$$

所以上面第二个等式成立。

若 $K_i t_i = r_i + U \beta_i$, 其中 β_i 使得 $t_i \perp \text{span}(U)$, 即

$$\beta_i = -(U^T K_i^{-1} U)^{-1} U^T K_i^{-1} r_i,$$

从而

$$\begin{aligned} \hat{K}_i t_i &= (I - U U^T) K_i (I - U U^T) t_i \\ &= (I - U U^T) K_i t_i \\ &= (I - U U^T) (r_i + U \beta_i) \\ &= r_i \end{aligned}$$

所以

$$\hat{K}_i^{-1} r_i = t_i = K_i^{-1} (r_i + U \beta_i) = K_i^{-1} (I - U(Y_r^T U)^{-1} Y_r^T) r_i,$$

从而上面第一个等式成立。

定理 3.1 若 K_i 与 $U^T K_i^{-1} U$ 非奇异,则由 \hat{K}_i^{-1} 预处理后的校正方程等价于

$$(I - Y_i(U^T Y_i)^{-1} U^T) K_i^{-1} (A - \mathcal{G}_i B) (I - Y_i(U^T Y_i)^{-1} U^T) z_i = -r_i' \quad (i=1,2,\dots,l),$$

其中 $z_i \perp \text{span}(U)$, $Y_i \equiv K_i^{-1} U$, $r_i' \equiv (I - \frac{Y_i U^T}{U^T Y_i}) K_i^{-1} r_i$ 。

证明: 由引理 3.2 的第二个等式可知,对校正方程两边同时作用 K_i^{-1} , 则有

$$\hat{K}_i^{-1} (I - U U^T) (A - \mathcal{G}_i B) (I - U U^T) z_i = -\hat{K}_i^{-1} r_i,$$

所以

$$\begin{aligned} &K_i^{-1} (I - U(Y_r^T U)^{-1} Y_r^T) (I - U U^T) (A - \mathcal{G}_i B) (I - U U^T) z_i \\ &= -(I - Y_i(U^T Y_i)^{-1} U^T) K_i^{-1} r_i \end{aligned}$$

又因为

$$(I - U(Y_r^T U)^{-1} Y_r^T) (I - U U^T) = (I - U(Y_i^T U)^{-1} Y_i^T),$$

$$z_i \perp \text{span}(U) \Leftrightarrow z_i = (I - \frac{Y_i U^T}{U^T Y_i}) z_i \Leftrightarrow z_i = (I - U U^T) z_i,$$

所以结论成立。

然而, 在块 Jacobi-Davidson 方法的实际计算过程中, 为避免计算矩阵 $(A - \mathcal{G}_i B)$ 的近似 K_i 的投影, 下面给出校正方程的一个等价形式。

定理 3.2 在块 Jacobi-Davidson 方法中, 由方程(2.10)可得

$$(a) \quad z_i = (I - U U^T) z_i, \quad (b) \quad F_i z_i = -r_i,$$

其中 $F_i = (I - U U^T)(A - \mathcal{G}_i B)(I - U U^T)$, $i = 1, 2, \dots, l$, 则方程(2.10)与下列增广方程等价

$$\begin{bmatrix} A - \mathcal{G}_i B & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_i \\ f_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -r_i \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (3.2)$$

即 z_i 是方程(3.2)的解当且仅当 z_i 是(2.10)的解。

证明: (" \Rightarrow ") 由

$$(I - U U^T)(A - \mathcal{G}_i B)(I - U U^T) z_i = -r_i, \quad z_i = (I - U U^T) z_i,$$

可得

$$\begin{aligned} (I - U U^T)(A - \mathcal{G}_i B) z_i &= -r_i, \\ (A - \mathcal{G}_i B) z_i - U U^T (A - \mathcal{G}_i B) z_i &= -r_i. \end{aligned}$$

令 $f_i = U^T (A - \mathcal{G}_i B) z_i$, 则

$$\begin{cases} (A - \mathcal{G}_i B) z_i + U f_i = -r_i, \\ U^T z_i = 0 \end{cases},$$

所以

$$\begin{bmatrix} A - \mathcal{G}_i B & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_i \\ f_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -r_i \\ 0 \end{bmatrix}.$$

(" \Leftarrow ") 由方程(3.2)可得

$$\begin{cases} U^T z_i = 0 \\ (A - \mathcal{G}_i B) z_i + U f_i = -r_i \end{cases},$$

因为 $r_i \perp \text{span}(U)$, 所以

$$(I - U U^T)((A - \mathcal{G}_i B) z_i + U f_i) = -r_i,$$

即 $(I - U U^T)(A - \mathcal{G}_i B) z_i = -r_i$ 。又由 $U^T z_i = 0$, 则 $z_i = (I - U U^T) z_i$, 从而可得

$$(I - U U^T)(A - \mathcal{G}_i B)(I - U U^T) z_i = -r_i \quad (i = 1, 2, \dots, l).$$

事实上, 在实际计算过程中, 需对上述增广矩阵作预处理, 从而有效求解校正向量 z_i 的值。

引理 3.3 对于 $Z \in R^{n \times l}$ 以及 $Y \in R^{n \times l}$, 有

$$\begin{bmatrix} I_n & Y \\ Z^T & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ Z^T & I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & Y \\ 0^T & -\nu \end{bmatrix},$$

其中 $\nu \equiv Z^T Y$, 当且仅当 $Z^T Y$ 非奇异时, $\begin{bmatrix} I_n & Y \\ Z^T & 0 \end{bmatrix}$ 可逆。

定理 3.3 如果 K_i 是矩阵 $A - \mathcal{G}_i B$ 的近似且易于求逆, 则有

$$\begin{bmatrix} K_i & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I_n & -Y_l \\ 0^T & I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ \nu^{-1} U^T & \nu^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_i^{-1} & 0 \\ 0^T & I_l \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

其中 $Y_l \equiv K_i^{-1} U$, $\nu \equiv U^T Y_l$, 且有

$$\begin{bmatrix} K_i & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} A - \mathcal{G}_i B & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_n & -Y_l \\ 0^T & I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ \nu^{-1} U^T & \nu^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_i^{-1}(A - \mathcal{G}_i B) & Y_l \\ U^T & 0 \end{bmatrix}.$$

证明: 因为

$$\begin{bmatrix} K_i & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_i & 0 \\ 0 & I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & K_i^{-1} U \\ U^T & 0 \end{bmatrix},$$

所以下式成立

$$\begin{bmatrix} K_i & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I_n & K_i^{-1} U \\ U^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} K_i^{-1} & 0 \\ 0 & I_l \end{bmatrix}.$$

又由引理 3.3 可知

$$\begin{bmatrix} K_i & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I_n & U \\ 0^T & -\nu \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ U^T & I_l \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} K_i^{-1} & 0 \\ 0^T & I_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_n & -Y_l \\ 0^T & I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ \nu^{-1} U^T & \nu^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_i^{-1} & 0 \\ 0 & I_l \end{bmatrix},$$

所以结论成立。

由定理 3.2, 对(3.2)式左预处理可得

$$\begin{bmatrix} K_i & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} A - \mathcal{G}_i B & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_i \\ f_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_i & U \\ U^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} -r_i \\ 0 \end{bmatrix},$$

又由定理 3.3 可得预处理方程为

$$\begin{bmatrix} I_n & -Y_l \\ 0^T & I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ \nu^{-1} U^T & \nu^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_i^{-1}(A - \mathcal{G}_i B) & Y_l \\ U^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_i \\ f_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{r}_i \\ -\nu^{-1} U^T K_i^{-1} r_i \end{bmatrix}, \quad (3.4)$$

其中 $\tilde{r}_i = -(I_n - Y_l \nu^{-1} U^T) K_i^{-1} r_i$ 。

综上所述, 下面给出预处理调和块 Jacobi-Davidson 方法。

算法 3.1 预处理调和块 Jacobi-Davidson 方法

1) 选取正整数 m , 允许误差 tol , 目标值 τ , 迭代块大小 p , 列正交规范矩阵 V_1 ,

$$W_1 = (A - \tau B)V_1;$$

2) 对 $k=1, 2, \dots, m-1$, 执行

2.1) 计算 $W_k^T A V_k y = \mathcal{G} W_k^T B V_k y$ 的 l 个最靠近 τ 的特征对 (\mathcal{G}_i, y_i) ($i=1, 2, \dots, l$), 并

计算 Ritz 向量 $u_i = V_k y_i$ 及相应残量 $r_i = A u_i - \mathcal{G}_i B u_i$ ($i=1, 2, \dots, l$);

2.2) 检测收敛性, 若收敛, 则算法停止, 否则进行下一步;

2.3) 求解 l 个校正方程

$$\begin{bmatrix} I_n & -Y_l \\ 0^T & I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ v_i^{-1} U_1^T & v_i^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_i^{-1}(A - \mathcal{G}_i B) & Y_l \\ U_1^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_i \\ f_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_i \\ -v_i^{-1} U_1^T K_i^{-1} r_i \end{bmatrix},$$

其中 K_i 为 $A - \mathcal{G}_i B$ 的近似, $v_i = U_1^T K_i^{-1} W_1$, $q_i = -(I_n - Y_l v_i^{-1} U_1^T) K_i^{-1} r_i$;

2.4) 由校正向量 z_i ($i=1, 2, \dots, l$), 通过 MGS 正交化过程将 V_k 扩充 V_{k+1} ;

2.5) 选取向量 w_i ($i=1, 2, \dots, l$), 将 W_k 扩充至 W_{k+1} ;

3) 重新开始: 记 $V_1 = [z_1, z_2, \dots, z_l]$, 在 W_m 中选取 l 个向量, 记为 W_1 , 返回 2);

在算法 3.1 中, 可以使用 Krylov 子空间方法求解校正方程, 如 GMRES 方法[23]。对于预处理矩阵 K_i 的选取可有多种形式, 如对角预处理、SSOR 预处理、不完全分解预处理等。另外, 矩阵 v_i ($i=1, 2, \dots, l$) 的维数较小, 所以容易求逆。

由于 Jacobi-Davidson 方法对于极端特征值的求解具有较好性质, 所以实际计算中校正方程 (3.4) 中 $A - \mathcal{G}_i B$ 可以取为 $A - \mathcal{G}_{\max} B$, 其中 \mathcal{G}_{\max} 为最靠近所求特征值的近似特征值。

第四章 块 Jacobi-Davidson 方法的重新开始与收缩技术

一般来说,对于投影类方法,为减少计算量与存储量以及避免重复计算已经收敛的特征对,该类方法通常都会结合重新开始[13-15,25-27]与收缩技术[13,26,28],且重新开始与收缩技术的好坏是投影类方法能否成功的重要因素之一。

4.1 块 Jacobi-Davidson 方法的收缩技术

在使用块 Jacobi-Davidson 方法计算广义对称特征值问题(2.3)时,若某些 Ritz 对的残量范数 $\|r_i\| = \|Au_i - Bu_i\|$ ($i=1,2,\dots,k$) 满足给定收敛精度,则通常认为该 Ritz 对 (\mathcal{Q}_i, u_i) 已经收敛。然而,由于所求问题需计算 l 个特征对,为了有效计算其余 $l-k$ 个特征对,块 Jacobi-Davidson 方法需继续迭代。事实上,块 Jacobi-Davidson 方法继续迭代仍可能计算那些已经收敛的 Ritz 对 (\mathcal{Q}_i, u_i) ,这样便会增加块 Jacobi-Davidson 方法的计算量及存储量。

记 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ 是广义对称特征值问题(2.3)的 n 个特征值, x_1, x_2, \dots, x_n 是相应的正交规范特征向量, $X_k = [x_1, x_2, \dots, x_k]$, $X_{l-k} = [x_{k+1}, x_{k+2}, \dots, x_l]$, $\Lambda_{l-k} = [\lambda_{k+1}, \lambda_{k+2}, \dots, \lambda_l]$, 则

$$AX_{l-k} = BX_{l-k}\Lambda_{l-k}.$$

由 x_1, x_2, \dots, x_n 的正交性可知

$$(I - X_k X_k^T)X_{l-k} = X_{l-k},$$

所以

$$A(I - X_k X_k^T)X_{l-k} = B(I - X_k X_k^T)X_{l-k}\Lambda_{l-k}.$$

上式两边同乘以矩阵 $(I - X_k X_k^T)$ 可得

$$(I - X_k X_k^T)A(I - X_k X_k^T)X_{l-k} = (I - X_k X_k^T)B(I - X_k X_k^T)X_{l-k}\Lambda_{l-k},$$

即特征对 (λ_i, x_i) ($i = k+1, k+2, \dots, l$) 也是收缩矩阵束

$$((I - X_k X_k^T)A(I - X_k X_k^T), (I - X_k X_k^T)B(I - X_k X_k^T))$$

的特征对。

对于块 Jacobi-Davidson 方法,假设 $\mathcal{Q}_1 \geq \mathcal{Q}_2 \geq \dots \geq \mathcal{Q}_k$ 是已经计算出的 k 个近似特征值, u_1, u_2, \dots, u_k 为相应的正交规范特征向量,记 $\Lambda_k' = [\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2, \dots, \mathcal{Q}_k]$, $U_k = [u_1, u_2, \dots, u_k]$ 。由上述推导过程可知,矩阵束 (A, B) 其余 $l-k$ 个所求特征值可通过对其收缩矩阵束

$$((I - U_k U_k^T)A(I - U_k U_k^T), (I - U_k U_k^T)B(I - U_k U_k^T))$$

使用块 Jacobi-Davidson 方法求得。

由块 Jacobi-Davidson 方法的推导过程可知,若 (\mathcal{Q}_i, u_i) ($i = k+1, k+2, \dots, l$) 是由块

Jacobi-Davidson 方法求出的矩阵束 (A, B) 其余 $l-k$ 个所求特征对的近似, 其中向量 u_1, u_2, \dots, u_l 正交规范。则矩阵 $U_{l-k} = [u_{k+1}, u_{k+2}, \dots, u_l]$ 的校正矩阵 $Z = [z_1, z_2, \dots, z_{l-k}]$ 需要满足如下校正方程

$$\begin{cases} (I - U_{l-k}U_{l-k}^T)(I - U_kU_k^T)(A - \mathcal{G}_l B)(I - U_kU_k^T)(I - U_{l-k}U_{l-k}^T)z_i = -r_i, \\ z_i \perp U_{l-k} \end{cases} \quad (i = 1, 2, \dots, l-k)$$

其中 $r_i = (I - U_kU_k^T)(A - \mathcal{G}_l B)(I - U_kU_k^T)u_i$ 。

记 $U_l = [U_k, U_{l-k}]$, 对上述块 Jacobi-Davidson 方法的校正方程使用左预处理, 可得

$$\begin{bmatrix} I_n & -Y_l \\ 0^T & I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ \nu_l^{-1}U_l^T & \nu_l^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_l^{-1}(A - \mathcal{G}_l B) & Y_l \\ U_l^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_i \\ f_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{r}_i \\ -\nu_l^{-1}U_l^T K_l^{-1}r_i \end{bmatrix},$$

其中 $Y_l \equiv K_l^{-1}U_l$, $\nu_l \equiv U_l^T Y_l$, $\tilde{r}_i = -(I_n - Y_l \nu_l^{-1}U_l^T)K_l^{-1}r_i$ 。

事实上, 若块 Jacobi-Davidson 方法迭代过程中存储矩阵 $Y_k \equiv K_i^{-1}U_k$, 则每次迭代只需计算矩阵 $Y_l \equiv K_i^{-1}[U_k, U_{l-k}]$ 的最后 $l-k$ 列 $Y_{l-k} \equiv K_i^{-1}U_{l-k}$, 另外, 若迭代过程存储矩阵 $\nu_l \equiv U_l^T Y_l = U_l^T K_i^{-1}U_l$, 则每次迭代只需计算矩阵

$$\nu_l \equiv U_l^T K_i^{-1}U_l = \begin{bmatrix} \nu_k & U_k^T K_i^{-1}U_{l-k} \\ U_{l-k}^T Y_k & U_{l-k}^T K_i^{-1}U_{l-k} \end{bmatrix}$$

的最后 $l-k$ 行和 $l-k$ 列。

4.2 动态稠密重新开始块 Jacobi-Davidson 方法

理论分析表明[29,30], 当在一个子空间中用投影类方法求解矩阵特征值问题时, 若该子空间含有所求特征向量的信息越丰富, 则收敛速度越快。然而, 算法在重新开始时会舍弃一部分有用的特征信息, 从而收敛速度会减慢。为了提高算法收敛速度, 人们研究了投影类方法的重新开始策略, 如 Ritz 向量的加权组合显式重新开始策略; Sorensen 等[26,27]提出的隐式重新开始策略; Morgon [25]提出的稠密重新开始策略; Stathopolus 等[14,15]提出的动态稠密重新开始策略。

与块 Arnoldi 方法相比, 块 Jacobi-Davidson 方法具有灵活性和健壮性等特点, 如块 Jacobi-Davidson 方法对初始向量个数没有限制, 在执行过程中可向基向量中添加任何额外的有用信息, 所以块 Jacobi-Davidson 方法在重新开始对于保留近似特征向量的个数没有限制, 即可以使用稠密重新开始。保留哪些近似特征向量以及保留多少近似特征向量? 一方面, 若多保留近似特征向量, 则重新开始时可以减少所求特征信息的丢失, 从而提高收敛性; 另一方面, 由于搜索子空间的最大维数 m 固定, 若保留过多近似特征向量, 则块 Jacobi-Davidson 方法不能有效地向搜索子空间中添加更多所求特征信息, 此外, 重新开始时还存在正交性等问题。

在重新开始时, 若保留的近似特征向量的个数多于所求特征向量的个数, 则称之为稠密重

新开始, 记为 $TR(k, m)$ 。实际上, 稠密重新开始方法是利用收缩性质来提高算法收敛性[14,25]。若求解靠近 σ 的特征值, 则重新开始时, 靠近 σ 的 Ritz 值所对应的 Ritz 向量应被保留。Morgan[25]指出通过保留 Ritz 向量可以对谱进行收缩, 使得所求特征值与谱的剩余部分得到有效分离, 即增加所求特征值与谱剩余部分的间距比, 从而提高重新开始方法的收敛性。另一方面, 由于谱的另一端也与间距比有关, 因此在实际的计算中, 一般采用动态稠密重新开始, 记为 $DTR(L, R)$, 其中 L, R 分别为谱最左端和最右端所保留的近似特征向量个数。

对于近似特征值 λ_i , 记其间距比为

$$\gamma_i = \frac{\lambda_i - \lambda_{i+1}}{\lambda_{i+1} - \lambda_N},$$

则在重新开始过程中, 需满足下述条件:

- 1) 使得间距比 γ_i 最大化,
- 2) 使得 $p = m - L - R$ 最大化。

在实际迭代过程中使得(4.1)式最大化, 即可满足上述要求

$$\max_{L=1, \dots, m, R=0, \dots, m-L, L+R < m} (m-L-R) \sqrt{\frac{\lambda_L - \lambda_{L+1}}{\lambda_{L+1} - \lambda_{m-R}}} \quad (4.1)$$

综上所述, 下面给出求解广义对称特征值问题的动态重新开始收缩块 Jacobi-Davidson 方法。

算法 4.1 动态重新开始收缩块 Jacobi-Davidson 方法

- 1) 选取最大迭代次数 m , 目标值 τ , 允许误差 tol , 迭代块大小 p , 所求特征值个数为 l , 列正交规范矩阵 V_1 , 已收敛特征值个数为 $k = 0$, 已收敛 Ritz 向量为 $U_k = []$, $Y_k = []$, $v_k = []$;
- 2) 对 $j = 1, 2, \dots, m-1$, 执行
 - 2.1) 计算 $V_j^T A V_j y = \mathcal{B} V_j^T B V_j y$ 的特征对 (\mathcal{B}_i, y_i) ($i = 1, 2, \dots, l-k$), 并计算 Ritz 向量 $u_i = V_j y_i$ 及相应残量 $r_i = A u_i - \mathcal{B}_i B u_i$ ($i = 1, 2, \dots, l-k$);
 - 2.2) 检测收敛性, 若有 a 个 Ritz 对收敛, 则 $k = k + a$, $U_k = [U_k, u_1, \dots, u_a]$, 若 $k = l$, 则算法结束, 否则返回 2) 继续迭代, 其中新的矩阵束为:

$$(A, B) = ((I - U_k U_k^T) A (I - U_k U_k^T), (I - U_k U_k^T) B (I - U_k U_k^T)),$$

$V_1 = [u_{a+1}, \dots, u_l]$, 否则进行下一步;

- 2.3) 计算 $Y_l = [Y_k, K_i^{-1} U_{l-k}]$, $v_l = \begin{bmatrix} v_k & U_k^T K_i^{-1} U_{l-k} \\ U_{l-k}^T Y_k & U_{l-k}^T K_i^{-1} U_{l-k} \end{bmatrix}$, 求解 $l-k$ 个校正方程

$$\begin{bmatrix} I_n & -Y_l \\ 0^T & I_l \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ v_l^{-1} U_l^T & v_l^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_i^{-1}(A - \mathcal{G}_l B) & Y_l \\ U_l^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_i \\ f_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{r}_i \\ -v_l^{-1} U_l^T K_i^{-1} r_i \end{bmatrix},$$

其中 $\tilde{r}_i = -(I_n - Y_l v_l^{-1} U_l^T) K_i^{-1} r_i$;

2.4) 由校正向量 $z_i (i=1, 2, \dots, l-k)$, 通过 MGS 正交化过程将 V_j 扩充 V_{j+1} ;

3) 重新开始: 若 $j \geq m-l+k$, 则由(4.1)式求得 L 和 R , 记 $V_1 = [v_1, \dots, v_L, v_R, \dots, v_j]$, 返回 2);

第五章 数值实验

本章的所有数值试验均是由 Matlab 7.0 实现。初始矩阵 V_1 随机产生, V_1 的 p 个列向量正交规范; l 为所求特征对的个数; m 为搜索子空间的最大维数; tol 为残量范数需要满足的误差标准。

为表述方便, 将块 Jacobi-Davidson 方法记为 BJD; 调和块 Jacobi-Davidson 方法记为 HBJD; 收缩的块 Jacobi-Davidson 方法记为 DBJD; 收缩的调和块 Jacobi-Davidson 方法记为 DHBJD。

5.1 校正方程中 $A-\mathcal{G}_l B$ 的合理选取

例 5.1 矩阵束 (A, B) 为取之于 Harwell-Boeing 矩阵集中的矩阵 bcsstk07 和 bcsstm07, 使用块 Jacobi-Davidson 算法求矩阵束 (A, B) 的四个最大特征对。

算法选取迭代块大小为 $p=l=4$, 搜索子空间的最大维数为 $m=20$, 误差标准为 $tol=1.0E-12*(norm(A,1)+norm(B,1))$, 预处理矩阵为 $K=A-\tau B$, 其中 $\tau=1.2E+08$ 。表 5.1 为块 Jacobi-Davidson 方法在校正方程中使用不同 $A-\mathcal{G}_l B$ 所得的特征值、相应的残量范数、迭代次数、所需迭代时间的比较, 其中值 \mathcal{G}_{max} 为块 Jacobi-Davidson 算法每次迭代过程中最接近给定值 τ 的 Ritz 值。

对于上述广义对称特征值问题, 使用 MATLAB 内部算法求得的四个最大特征值分别为 1.02528339480467 E+08, 1.01487249770668 E+08, 1.01249762585490 E+08, 1.01196076671289 E+08。

表 5.1 不同 $A-\mathcal{G}_l B$ 对应的 BJD 方法的数值结果

算法	特征值	残量范数	迭代次数	迭代时间(秒)
$A-\mathcal{G}_l B$ 对应的 BJD	1.02528339480467 E+08	3.4112E-06	21	87.625
	1.01487249770668 E+08	1.7900E-05		
	1.01249762585490 E+08	5.0485E-04		
	1.01196076671289 E+08	1.3750E-03		
$A-\mathcal{G}_{max} B$ 对应的 BJD	1.02528339480467 E+08	6.7539E-06	23	36.833
	1.01487249770668 E+08	1.3298E-04		
	1.01249762585490 E+08	4.8446 E-04		
	1.01196076671289 E+08	1.1771E-03		

由表 5.1 可见, 当块 Jacobi-Davidson 的校正方程(3.4)中值 \mathcal{G}_l 取为 \mathcal{G}_{max} 时, 虽然块

Jacobi-Davidson 方法的迭代次数有所增加,但迭代时间比使用一般 \mathcal{G}_l 所需迭代时间要少。事实上,当校对方程(3.4)使用 \mathcal{G}_{\max} 时,虽然每次迭代需计算 p 次校对方程,但校对方程左端的系数矩阵仅需计算一次,因而计算量大大减少。另外,由块 Jacobi-Davidson 方法的收敛性可知,块 Jacobi-Davidson 方法对于广义对称特征值问题的端部特征值具有较好的收敛性,所以在块 Jacobi-Davidson 方法的迭代过程中端部特征值较其他特征值收敛要快,又因为所求问题为稠密特征值问题,所以可用 \mathcal{G}_{\max} 作为 \mathcal{G}_l 的近似。在后面的数值例子中,均使用 \mathcal{G}_{\max} 作为 \mathcal{G}_l 的近似。

5.2 Jacobi-Davidson 方法和块 Jacobi-Davidson 方法的比较

例 5.2 矩阵束 (A,B) 同样取之于 Harwell-Boeing 矩阵集中的矩阵束,分别为 bcsstk06 和 bcsstm06,分别使用 Jacobi-Davidson 方法和块 Jacobi-Davidson 方法求矩阵束 (A,B) 的四个最大特征对。

计算过程中,算法分别取搜索子空间的最大维数为 $m=20$,预处理矩阵为 $K=A-\tau B$,其中 $\tau=5.0E+08$,误差标准为 $tol=1.0E-12*(norm(A,1)+norm(B,1))$ 。在块 Jacobi-Davidson 算法中,选取迭代块大小为 $p=l=4$,另外,算法的最大迭代次数为 100。表 5.2 为 Jacobi-Davidson 方法和块 Jacobi-Davidson 方法求得特征值、相应的残量范数、所需迭代次数、迭代时间的比较。矩阵束 (A,B) 的四个所求特征对所对应的相对残量范数的变化情况如图 5.1 和图 5.2 所示,图中横坐标为迭代次数,纵坐标为相对残量范数的对数 $\log_{10}(\|r_1\|/\|r\|)$,其中 $r=Au-\mathcal{G}Bu$ 表示算法所求的 Ritz 对 (\mathcal{G},u) 的残量, r_1 为初始残量。

表 5.2 JD 方法与 BJD 方法的数值结果

算法	特征值	残量范数	迭代次数	迭代时间(秒)
JD	4.74743665590524E+08	1.1103E-03	100	182.415
	4.74743665590522E+08	6.2391E-03		
	4.74743657826028E+08	13.47752		
	4.74743657312906E+08	20.50458		
BJD	4.74743665590523E+08	1.9196E-04	17	30.594
	4.74743665590523E+08	1.2385 E-04		
	4.74743657856419E+08	3.1845 E-04		
	4.74743657856418E+08	5.1643E-04		

对于上述广义对称特征值问题,由 MATLAB 内部算法求得的四个最大特征值为密集特征值,分别为 4.74743665590523E+08, 4.74743665590522E+08, 4.74743657856420E+08,

4.74743657856419E+08。

由表 5.2 可见, 当算法达到给定最大迭代次数时, Jacobi-Davidson 方法仅有效求解出两个极端特征值, 其余两个所求特征值未能达到给定的收敛精度, 而使用块 Jacobi-Davidson 方法则可以有效求解出四个所求特征值, 且与 Jacobi-Davidson 方法相比迭代次数与迭代时间较少。事实上, 由图 5.1 可以看出, 当迭代次数较少时, Jacobi-Davidson 方法便有效求解出矩阵束 (A, B) 的一个端部特征值, 这也说明 Jacobi-Davidson 方法对于求解单个端部特征值的有效性。再迭代一定次数之后, Jacobi-Davidson 方法求解出矩阵束 (A, B) 的另一个端部特征值, 而继续迭代未能提高另外两个所求特征值的收敛性; 而由图 5.2 可以看出, 对矩阵束 (A, B) 使用块 Jacobi-Davidson 方法所求得的四个特征值的收敛性质一致, 且收敛性较好, 只需较少迭代便可求出四个所求特征值。这说明在求解广义对称特征值问题多个密集特征值时, 使用块 Jacobi-Davidson 方法比 Jacobi-Davidson 方法要好。

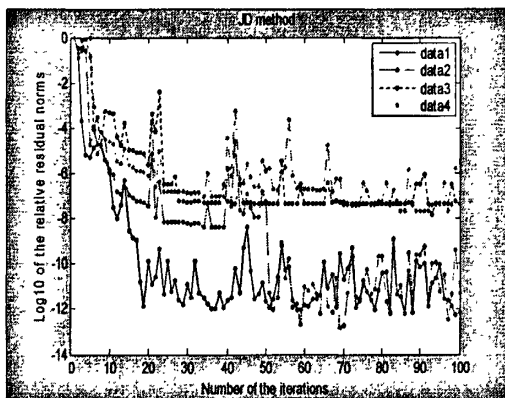


图 5.1 JD 方法

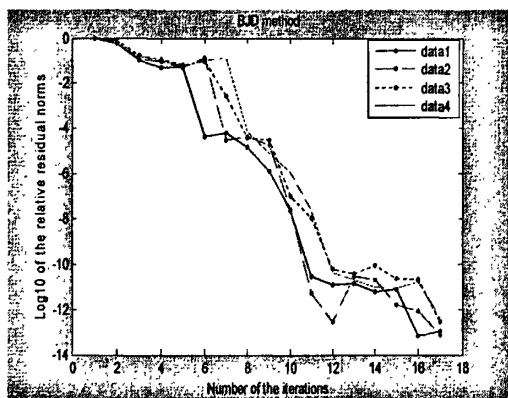


图 5.2 BJD 方法

5.3 块 Jacobi-Davidson 方法使用不同预处理算子及调和策略的比较

例 5.3 矩阵束 (A, B) 同样取例 5.2 中 bcsstk06 和 bcsstm06, 使用不同预处理形式的块 Jacobi-Davidson 方法求矩阵束 (A, B) 的四个最大特征对。

与例 5.2 类似, 取 $p = l = 4$, $m = 20$, $tol = 1.0E-12 * (norm(A, 1) + norm(B, 1))$ 。记矩阵 $M = A - \tau B$, 其中 $\tau = 5.0E + 08$, 块 Jacobi-Davidson 方法中校正方程的预处理矩阵分别取为矩阵 M 本身、矩阵 M 的 5 对角预处理以及矩阵 M 的 SSOR 预处理。表 5.3 为使用不同预处理形式的块 Jacobi-Davidson 方法求得的特征值、相应的残量范数、所需迭代次数、迭代时间的比较。

由表 5.3 可以看出, 预处理矩阵的不同选取形式对于块 Jacobi-Davidson 方法的收敛性影响较大, 选择恰当的 M 能够有效的减少算法的计算量与存储量。若要满足给定误差标准, 矩阵 M 的 5 对角预处理与其它两种预处理形式相比, 收敛性较好且计算量较少。事实上, 在一些数值

算例中发现,当矩阵 M 是对角占优矩阵时,使用对角预处理的收敛性比其它两种预处理形式要好,这也说明预处理矩阵的正确选取对于块 Jacobi-Davidson 方法的收敛性非常重要,有时甚至对算法是决定性的。

表 5.3 使用不同预处理矩阵的 BJD 方法的数值结果

预处理算子	特征值	残量范数	迭代次数	迭代时间(秒)
M	4.74743665590523E+08	1.9196E-04	17	30.766
	4.74743665590523E+08	1.2385E-04		
	4.74743657856419E+08	3.1845E-04		
	4.74743657856419E+08	5.1643E-04		
M 的 5 对角 预处理	4.74743665590521E+08	2.3584E-03	15	12.453
	4.74743665590523E+08	2.9355E-04		
	4.74743657856418E+08	2.2315E-03		
	4.74743657856416E+08	1.3671E-03		
M 的 SSOR 预处理	4.74743665590600E+08	1.2641E-03	19	42.984
	4.74743665590523E+08	1.0029E-03		
	4.74743657856437E+08	1.1643E-03		
	4.74743657856416E+08	2.9564E-04		

例 5.4 此问题来源于 [31], 对于矩阵束 $(A(t), B(t))$, 其中矩阵 $A(t) \in SR^{1000 \times 1000}$, $B(t) \in SR_+^{1000 \times 1000}$, 矩阵 $A(t)$ 具有如下非零元:

$$A_{i,j}(t) = \begin{cases} 2t+2, & i=2 \\ t^3+1, & i=3 \\ 3i, & i \neq 2,3 \end{cases} \quad i=1,2,\dots,1000,$$

$$A_{i,i+1}(t) = A_{i+1,i}(t) = \begin{cases} t^2/2, & i=2 \\ i, & i \neq 2 \end{cases} \quad i=1,2,\dots,999,$$

$$A_{i,i+2}(t) = A_{i+2,i}(t) = 5 \quad i=1,2,\dots,998,$$

$$A_{1,1000}(t) = A_{1000,1}(t) = 10,$$

矩阵 $B(t)$ 具有如下非零元:

$$B_{i,i}(t)=\begin{cases} t^3/2+1, & i=1 \\ 5, & i\neq 1 \end{cases} \quad i=1,2,\cdots,1000,$$

$$B_{i,i+1}(t)=B_{i+1,i}(t)=\begin{cases} t-0.5, & i=1 \\ 1.5, & i\neq 1 \end{cases} \quad i=1,2,\cdots,999,$$

$$B_{i,i+2}(t)=B_{i+2,i}(t)=-0.05 \quad i=1,2,\cdots,998.$$

应用块 Jacobi-Davidson 方法和调和块 Jacobi-Davidson 方法计算矩阵束 $(A(t), B(t))$ 在 $t=2$ 时最靠近给定值 $\tau=100$ 的三个特征对。算法分别选取 $m=20$, $p=3$, $tol=1.0E-08$, 由调和策略将测试子空间取为 $(A-\tau B)V$, 另外, 预处理矩阵取为 $M=A-\tau B$, 其中 $\tau=100$ 。对块 Jacobi-Davidson 方法和调和块 Jacobi-Davidson 方法分别使用矩阵 M 的三对角及五对角预处理, 求得特征值、相应残量范数、所需迭代次数、迭代时间的比较见表 5.3 与表 5.4。另外, 矩阵束 $(A(2), B(2))$ 由块 Jacobi-Davidson 方法及调和块 Jacobi-Davidson 方法求得的三个特征对所对应的相对残量范数的变化如图 5.3, 图 5.4, 图 5.5, 图 5.6 所示。

对于上述广义对称特征值问题, 由 MATLAB 内部 QZ 算法求得的最靠近 100 的三个特征值为密集特征值, 分别为 99.484644486119, 100.067027841776, 100.649411197433。

表 5.4 使用三对角预处理的计算结果

算法	特征值	残量	迭代次数	迭代时间(秒)
BJD	99.484644486120	1.0386E-012	38	226.703
	100.067027841776	8.3451E-09		
	100.649411197433	4.9958E-09		
HBJD	99.484644486117	2.1570E-09	30	89.26
	100.067027841776	3.4542E-10		
	100.649411197436	3.6856E-09		

表 5.5 使用五对角预处理的计算结果

算法	特征值	残量	迭代次数	迭代时间(秒)
BJD	99.484644486120	8.6535E-13	24	203.94
	100.067027841776	1.3327E-12		
	100.649411197433	1.3397E-09		
HBJD	99.484644486118	1.2243E-10	14	56.18
	100.067027841776	2.4903E-13		
	100.649411197431	3.1113E-09		

由表 5.4 及表 5.5 的对比可以看出在相同预处理矩阵时, 使用调和策略可以有效减少迭代

次数与迭代时间。另外，由图 5.3，图 5.5 和图 5.4，图 5.6 的对比可见，使用调和策略可以有效地提高算法的收敛性，使得算法收敛具有规律性，这也说明调和策略的有效性；由图 5.3，图 5.4 和图 5.5，图 5.6 的对比可见在使用相同块 Jacobi-Davidson 方法或者调和块 Jacobi-Davidson 方法时，不同预处理矩阵所对应的算法收敛性有所不同，当使用五对角预处理矩阵时，块 Jacobi-Davidson 方法和调和块 Jacobi-Davidson 方法的迭代次数与迭代时间均比使用三对角预处理时要好得多，进一步说明了预处理策略的合理选取直接影响块 Jacobi-Davidson 方法的收敛性。

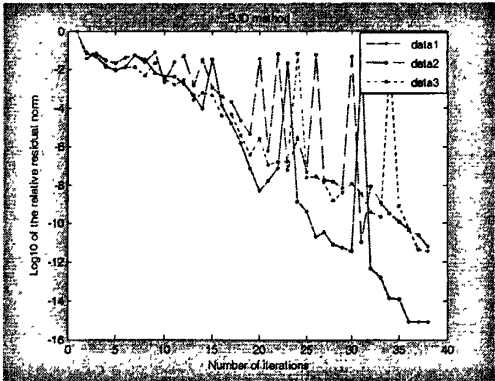


图 5.3 三对角预处理 BJD 方法

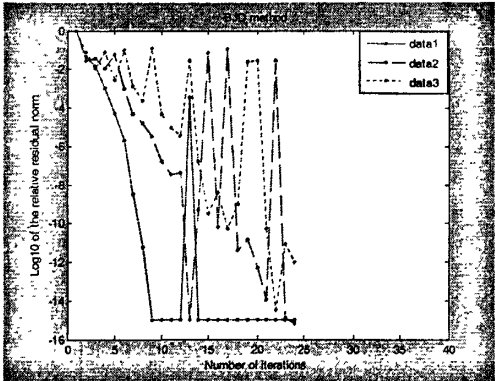


图 5.4 五对角预处理 BJD 方法



图 5.5 三对角预处理 HBJD 方法

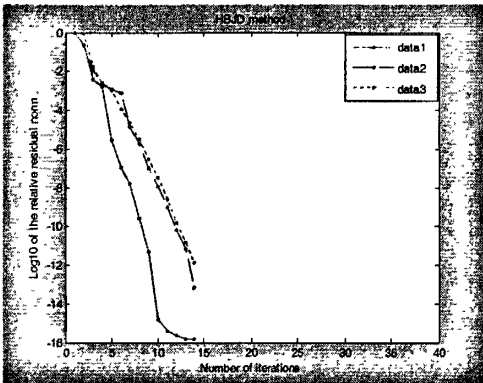


图 5.6 五对角预处理 HBJD 方法

5.4 调和块 Jacobi-Davidson 方法的动态重新开始及收缩技术的应用

例 5.5 此问题来源于[32]，考虑 1000 阶广义对称特征值问题 $Ax = \lambda Bx$ ，其中矩阵 A 是半带宽为三的实对称矩阵，其主对角元素为 $diag(1,2,\cdots,1000)$ ，次对角线元素为 1.2，第三对角线元素为 0.42，第四对角线元素为 0.8，矩阵 $B = Diag(2,3,\cdots,1000,1001)$ 。分别使用块 Jacobi-Davidson 方法，收缩块 Jacobi-Davidson 方法，调和块 Jacobi-Davidson 方法以及收缩调和块 Jacobi-Davidson 方法计算矩阵束 (A,B) 最靠近 1 的五个特征对。

算法选取迭代块大小为 $p=l=5$ ，搜索子空间的最大维数为 $m=20$ ，误差标准为 $tol=1.0E-08$ ，测试子空间分别取为 V 和 $(A-\tau B)V$ ，预处理矩阵取为 $K=(A-\tau B)$ ，其中 $\tau=1$ 。表 5.6 为块 Jacobi-Davidson 方法与调和块 Jacobi-Davidson 方法的比较，表 5.7 为收缩块 Jacobi-Davidson 方法与收缩调和块 Jacobi-Davidson 方法的比较。

对于上述广义对称特征值问题，由 MATLAB 内部算法求得的最靠近 1 的五个特征值为密集特征值，分别为 0.999902734216766, 0.99994752875105, 0.99999248646367, 1.00003760164470, 1.00008286859364。

从表 5.6 可以看出，对块 Jacobi-Davidson 方法使用调和策略能够有效减少迭代次数和迭代时间。另外，由表 5.6 和表 5.7 对比可以看出，对块 Jacobi-Davidson 方法与调和块 Jacobi-Davidson 方法使用收缩技术能够减少迭代时间，但是迭代次数没有减少。事实上，当某些特征对满足误差标准时，采用收缩策略将其收缩，从而在以后迭代过程中只需求解剩余特征对，而收缩策略并没有向搜索子空间中添加更多有用的特征信息，因而迭代次数没有减少。

表 5.6 BJD 方法与 HBJD 方法的比较

算法	五个最靠近 1 的特征值	相应残量范数	迭代次数	迭代时间(秒)
BJD	0.999902734216766	3.3970e-010	57	94.07
	0.999947528751054	1.6784e-011		
	0.999992486463672	1.0933e-012		
	1.000037601644786	2.7610e-012		
	1.000082868593659	2.5267e-012		
HBJD	0.999902734217308	4.4914e-009	17	34.053
	0.999947528751051	6.9282e-013		
	0.999992486463672	8.0512e-013		
	1.000037601644786	2.9567e-013		
	1.000082868593721	1.3380e-009		

表 5.7 DBJD 方法与 DHBJD 方法的比较

算法	五个最靠近 1 的特征值	相应残量范数	迭代次数	迭代时间(秒)
DBJD	0.999902734216758	2.9558e-012	61	66.028
	0.999947528751033	3.1253e-011		
	0.999992486463672	8.6778e-012		
	1.000037601644781	9.5262e-009		
	1.000082868593665	3.5572e-012		
DHBJD	0.999902734216762	3.7091e-013	18	24.132
	0.999947528751053	7.4136e-012		
	0.999992486463672	7.3901e-012		
	1.000037601644785	5.5815e-010		
	1.000082868593571	8.8646e-009		

第六章 结论

本文主要对求解广义对称特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法进行了研究。首先, 对 Jacobi-Davidson 方法进行块化, 得到可以求解重或者密集特征值的块 Jacobi-Davidson 方法。其次, 将调和策略和预处理策略与块 Jacobi-Davidson 方法有机结合, 形成调和块 Jacobi-Davidson 方法。最后, 为减少块 Jacobi-Davidson 方法的计算量与存储量以及避免重复计算已经收敛的特征值, 文章对块 Jacobi-Davidson 方法应用动态重新开始技术和收缩技术。数值试验表明, 块 Jacobi-Davidson 方法与 Jacobi-Davidson 方法相比具有优势; 使用调和策略和预处理策略可以有效的求解内部特征值; 使用动态重新开始和收缩技术可以有效减少算法的计算量与存储量。

本文仅对校正方程的预处理算子作一般的研究, 可以进一步提出更加有效的预处理算子。此外, 本文取块 Jacobi-Davidson 方法的迭代块大小为所求特征对的个数, 可以对此作进一步的研究。

参考文献

- [1] Davidson E R. The iteration calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real symmetric matrices. *J Comp Phys*, 1975, 17: 87-94.
- [2] Kalamboukis T Z. Davidson's algorithm with and without perturbation corrections. *J Phys A: Math Gen*, 1980, 13: 57-62.
- [3] Morgan R B, Scott D S. Generalizations of Davidson's method for computing eigenvalues of sparse symmetric matrices. *SIAM J Sci Stat Comput*, 1986, 7: 817-825.
- [4] Morgan R B. Generalizations of Davidson's method for computing eigenvalues of large nonsymmetric matrices. *J Comp Phys*, 1992, 101: 287-291.
- [5] Crouzeix M, Philippe B, Sadkane M. The Davidson method. *SIAM J Sci Comput*, 1994, 15: 62-76.
- [6] Sadkane M, Sidje R B. Implementation of a variable block Davidson method with deflation for solving large sparse eigenproblems. *Numerical Algorithms*, 1999, 20: 217-240.
- [7] Sleijpen G L G, Van der Vorst H A. A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems. *SIAM J Matrix Anal Appl*, 1996, 17: 401-425.
- [8] Sleijpen G L G, Booten A G L, Fokkema D R, Van der Vorst H A. Jacobi-Davidson type methods for generalized eigenproblems and polynomial eigenproblems. *BIT Numer Math*, 1996, 36: 595-633.
- [9] Sleijpen G L G, Van der Vorst H A, Meijerink E. Efficient expansion of subspaces in the Jacobi-Davidson method for standard and generalized eigenproblems. *ETNA*, 1998, 7: 75-89.
- [10] Van den Eshof J. The convergence of Jacobi-Davidson iterations for Hermitia eigenproblems. *Numer Linear Algebra Appl*, 2002, 9: 163-179.
- [11] Notay Y. Combination of Jacobi-Davidson and conjugate gradients for the partial symmetric eigenproblem. *Numer Linear Algebra Appl*, 2002, 9: 21-44.
- [12] 戴小英, 高兴誉. 特征值问题的 Davidson 型方法及其实现技术. *数值计算与计算机应用*, 2006, (3): 218-240.
- [13] Fokkema D R, Sleijpen G L G, Van der Vorst H A. Jacobi-Davidson style QR and QZ algorithms for the partial reduction of matrix pencils. *SIAM J Sci Comput*, 1998, 20: 94-125.
- [14] Stathopoulos A, Saad Y, Wu K. Dynamic thick restarting of the Davidson, and the implicitly restarted Arnoldi methods. *SIAM J Sci Comput*, 1998, 19: 227-245.

- [15] Stathopoulos A, Sadd Y. Restarting techniques for the (Jacobi-) Davidson symmetric eigenvalue methods. *ETNA*, 1998, 17: 163-181.
- [16] Morgan R B, Zeng M. Harmonic projection methods for large non-symmetric eigenvalue problems. *Numer Linear Algebra Appl*, 1998, 5:33-55.
- [17] Morgan R B, Zeng M. A harmonic restarted Arnoldi algorithm for calculating eigenvalues and determining multiplicity. *Linear Algebra Appl*, 2006, 415:96-113.
- [18] Jia Z. The refined harmonic Arnoldi method and an implicitly restarted refined algorithm for computing interior eigenpairs of large matrices. *Appl Numer Math*, 2002, 42: 489-512.
- [19] Sleijpen G L G, Van den Eshof J. On the use of harmonic Ritz pairs in approximating internal eigenpairs. *Linear Algebra Appl*, 2003, 358:115-137.
- [20] Saad Y. *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*. Manchester: Manchester University Press, 1992.
- [21] Wilkinson J H. *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford: Clarendon Press, 1965.
- [22] 曹志浩. 矩阵特征值问题. 上海: 上海科学技术出版社, 1980.
- [23] Saad Y. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- [24] Stewart G W. *Matrix Algorithms II: Eigensystems*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2001.
- [25] Morgan R B. On restarting the Arnoldi method for large nonsymmetric eigenvalue problems. *Math Comp*, 1996, 65: 1213-1230.
- [26] Sorensen D C. Implicit application of polynomial filters in a k-step Arnoldi method. *SIAM J Matrix Anal Appl*, 1992, 13: 357-385.
- [27] Lehoucq R B. Implicitly restarted Arnoldi methods and subspace iteration. *SIAM J Matrix Anal Appl*, 2001, 23: 551-562.
- [28] Lehoucq R B, Sorensen D C. Deflation techniques for an implicitly restarted Arnoldi iteration. *SIAM J Matrix Anal Appl*, 1996, 17: 789-821.
- [29] Jia Z X. Refined iterative algorithms based on Arnold's process for large unsymmetric Eigenproblems. *Linear Algebra Appl*, 1997, 259: 1-23.
- [30] Jia Z X. Composite orthogonal projection methods for large eigenproblems. *Science in China (Series A)*, 1999, 42: 577-585.
- [31] Xie H Q, Dai H. Davidson method for eigenpairs and their partial derivatives of generalized eigenvalue problems. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 2006, 22:

155-165.

- [32] Saberi Najafi H, Refahi A. A new restarting method in Lanczos algorithm for generalized eigenvalue problem. Appl Math Comput, 2007, 184: 421-428.

致 谢

本文的全部工作都是在导师戴华教授的悉心指导和帮助下完成的。我衷心的感谢我的导师，在两年多的研究生学习中，导师不仅传授给我专业知识，还教我如何做人做事，他渊博的知识，宽厚的为人，严谨的治学态度使我终生学之不尽，受益匪浅。与此同时，他还提供各种机会使我了解本专业及相关专业的知识，为我以后学习打下了扎实的基础。

在学期间，我还得到王正盛老师、汪晓虹老师、刘崴老师、倪勤等老师的悉心授课、指导和帮助，他们严谨求学、认真负责的工作态度、投身学术的敬业精神一直是我学习和工作的榜样，在此，向他们表示最诚挚的感谢！

我还要感谢我的师兄师姐，他们在我的学习和生活中给予了很多的帮助和指导。

最后，我要特别感谢我的家人对我深深的关爱和大力支持。

在学期间的研究成果及发表的学术论文

1. 高雄, 戴华. 求解广义对称特征值问题的调和块 Jacobi-Davidson 方法. 高等学校计算数学学报. (已投)