学校编码: 10384　　　　分类号 ______ 密级 ______
学　号:19020060153163　　　　UDC ____________________

厦门大学

博士学位论文

求解某些特殊稀疏线性系统的数值方法

The Numerical Methods for Some Special Sparse Linear Systems

王瑞瑞

指导教师姓名: 卢琳璋教授
专业名称: 计算数学

论文提交日期: 2009 年 4 月
论文答辩日期: 2009 年 　月
学位授予日期: 2009 年 　月

答辩委员会主席: ____________
评　阅　人: ____________

2009年 6 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

声明人(签名):

年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于

1、保密（ ），在 年解密后适用本授权书。

2、不保密（ ）。

作者签名： 日期： 年 月 日

导师签名： 日期： 年 月 日

摘 要

大型稀疏线性系统来源于很多应用领域, 譬如流体动力学, 结构分析, 电磁场计算等等. 将描述自然现象的偏微分方程离散后, 通常就会得到一个稀疏的线性系统. 这样一来, 实时高效的求解大型的稀疏线性系统对整个应用问题的解决有着至关重要的作用. 因此, 近年来无论国内还是国外, 大规模稀疏线性系统的求解算法的研究已成为大规模科学与工程计算的一个重要研究领域. 进一步, 由于许多实际问题产生的大规模稀疏线性系统, 其系数矩阵往往都是具有某种特殊形式或者某种特殊结构, 因此本文主要研究的是一些特殊形式的稀疏线性系统快速、有效的数值求解方法. 全文共分为五章.

第一章介绍了大规模稀疏线性系统问题的来源、历史、发展现状以及本文所涉及的几种特殊稀疏线性系统.

在第二章, 我们给出了求解大规模稀疏位移线性系统的一种增广的重新启动 GMRES 方法：每次重新启动时, 将母系统所得到的多个误差向量添加到求解的 Krylov 子空间中去, 在新的增广的空间中求解母系统, 而子系统的解通过强行使其残量和母系统的残量平行得到. 这样不仅能使我们在同一个空间中求解子母系统, 还能加速求解位移线性系统重新启动 GMRES 方法的收敛速度, 数值试验也表明这种方法的高效性.

第三章针对块三对角系统, 给出了一种切频率过滤预条件子的变形. 新的预条件子是建立在块三对角矩阵的一种组合分解基础上, 并满足特定的过滤性质得到的, 新的预条件子有着天然的并行性. 我们简单分析了新的预条件子的一些性质, 在实际运用中, 我们将所得的新的预条件子与传统的 $ILU(0)$ 按照某种乘法的形式结合起来使用. 数值试验详细比较了这种新的预条件子与传统的预条件子的数值效果, 给出了这种预条件子的优势和缺陷.

第四章我们给出了对于求解 Sylvester 方程的一种预条件的梯度迭代方法, 预条件通过合理的选择两个辅助矩阵实现. 这一想法可以看做为一般化线性系统的分裂迭代到 Sylvester 方程中来. 我们在数值试验中比较了这种迭代格式和原始的迭代法, 结果表明预条件的梯度迭代法在求解 Sylvester 方程时收敛得要更快, 另外我们也通过试验数值上分析了步长参数对于算法收敛的影响.

在第五章, 我们提出并且分析了对于一般鞍点问题的一种预条件子, 这种预条件子是建立矩阵分裂和最近提出的一种双参数的分裂迭代技术 [Z. Z Bai and G. H. Golub, IMA J. Numer. Anal.,27, (2007), pp.1-23] 基础上的. 我们详细分析了预条件后矩阵谱的性质, 并且通过数值试验验证了我们的理论和这种预条件子的效率.

关键词：Krylov 子空间方法; 位移线性系统; 块三对角矩阵; Sylvester 方程; 鞍点问题.

Abstract

Large scale sparse linear systems arise in many area, such as fluid dynamics, structural analysis, numerical calculation of electromagnetic fields, and so on. When discreting the PDEs which describe the phenomena, we generally obtain sparse linear systems. Therefore, Solving these systems efficiently is of vital importance for solving the whole problem. So, study on the numerical methods for solving large sparse linear systems is an important field in large scale scientific and Engineering computation. Furthermore, many large scale linear systems arising in practical problems are often of some special forms or particular structures, Therefore, this thesis investigates the fast and efficiently numerical method for solving some special linear systems, the text is divided into five chapters.

Chapter 1 gives an introduction of the origin, history, state of iterative methods for solving large sparse linear system of equations. And we also briefly introduce the special linear systems which were studied in this paper.

In chapter 2, a novel restarted GMRES method for solving large sparse shifted linear systems is developed. Restarting is carried out by augmenting the Krylov subspaces with some error approximations generated by the *seed* system, we firstly seek the solution of the seed system in the augmented Krylov subspaces and acquire the solutions of add systems by making the residual vectors parallel to the residual vector of seed system. The new method preserves the nice property that allows solving the *seed* and *add* systems in one subspace. And it also effectively accelerates the convergence of the restarted GMRES method for solving the shifted linear systems. Numerical experiments indicates the efficiency of the new method.

In Chapter 3, we considers the block-tridiagonal linear system of equations, a variant of tangential filtering preconditioners is proposed. The new variant is based on a twisted block factorization along with certain filtering property. In the practical application, a class of composite preconditioners are tested, which are constructed by combining the twisted tangential filtering decomposition preconditioner with the classical $ILU(0)$ preconditioner in a multiplicative way. The

performance of the new preconditioners are compared with other classical preconditioners, the superiority and the weakness of the preconditioners are proposed.

In chapter 4, we illustrate the preconditioned gradient based iterative method which can be derived by reasonable choice of two auxiliary matrices. The strategy is a natural generalization of the splitting iteration methods for linear systems of equations. The performance of the preconditioned gradient based iterative method is compared with the original method on several numerical examples. A better convergence behavior is revealed, and the influence of an step-size parameter is experimentally studied.

In the last chapter, we propose a preconditioner for a class of the generalized saddle point problems. The preconditioner is based on matrix splitting, and a new proposed two parameters splitting iteration technique [Z. Z Bai and G. H. Golub, IMA J. Numer. Anal.,27, (2007), pp.1-23]. The spectral properties of the preconditioned matrix are discussed in detail. Numerical experiments are given to show the conclusion and the efficiency of the precondtioner.

目 录

Contents

第一章 绪 论

§1.1 线性系统的研究背景与现状

众所周知, 很多实际问题都是通过偏微分方程来描述的, 离散这些偏微分方程往往会得到下面的稀疏线性系统

$$Ax = b. \tag{1.1}$$

为了对产生这些问题的现象进行模拟, 不可避免的就需要求解上面的稀疏线性系统. 一般来说离散化的精度越高, 模拟的效果就会越好, 但是同时所得到系统的规模就越大, 从而就使大部分的时间花费在对线性系统的求解上. 例如地下水道模拟领域, 所涉及的线性系统求解时间占到总的模拟时间的 80%[1]. 因此大规模稀疏线性系统的求解问题成了模拟问题的核心, 如何有效快速的求解大规模稀疏线性系统成为科学工程计算的一个热门, 国内外研究都非常的活跃.

一般来说, 线性系统的求解方法分为两大类, 即直接法和迭代法.

直接法是利用高斯消去过程对系数矩阵 A 进行 LU 分解 [2], 将原系统转化为两个相对简单的三角系统来求解, 即

$$A = LU$$

$$Ly = b, \quad Ux = y,$$

其中 L 为下三角阵, U 为上三角阵. 如果系数矩阵的阶数为 n, 那么上面所描述的直接法所需要的的运算量和存储量为 $O(n^3)$, 所以对于一般的大规模稀疏线性系统, 直接法是不适用的, 但是也不是说直接法就失去了用武之地, 现代实用的直接法可以利用系数矩阵的稀疏结构以及计算机的等级存储结构来对高斯消去过程优化, 从而避免某些零元的存储和运算, 并且直接法还是一种相对来说比较健壮的算法, 所以在许多结构分析以及电路网络模拟领域, 直接法仍然发挥着不可替代的作用. 目前关于直接法有很多流行的软件包, 譬如 I. S. Duff 等人开发的一系列代码 [3, 4], Xiaoye Li 和 J. Demmel 等人开发的 SuperLU[5] 等. 关于直接法软件包总结可以参考 [6]. 虽然这些基于直接法的软件包优化了高斯消去过程所需要的存储量和运算量, 但是对高维复杂问题离散所产生的超大规模的稀疏线性系统, 采用直接法求解就会对现行计算机硬件提出挑战, 往往会造成内存不足的问题. 一般来说, 对于大规模稀疏线性系统, 首选的是迭代法.

迭代法的发展来已经经历了快 200 年的历史, 其发展经历了几个阶段从 Gauss-Seidel 算法到松弛类型迭代法, 从 Richardson 算法到 Chebyshev 半迭代格式, 从 CG 到现在流行的 Krylov 子空间类型算法.

尽管早在 1950 年初就已经提出了 Lanczos 算法 [7], Arnoldi 算法 [8] 以及 CG[9] 等 Krylov 子空间算法, 但是, Krylov 子空间算法真正得到认可并且快速发展是从 1970 开始的, 其中 J. K. Reid 在 1971 年的工作 [10] 起到了推动性的作用. 在那篇文章中, 作者注意到如果系数矩阵的条件数不是太大的情况下, CG 算法能够在远小于 n 步内达到收敛. 因此,20 年后人们再次考虑 CG 以及其他类型的 Krylov 子空间算法. 伴随着预条件的深入研究, 根据系数矩阵不同的性质人们逐步提出了 MR, CGR BI-CG, BI-CGStable, CGS, BI-CGStable(l), GMRES, GMRES-E, GMRES-D, IDR 等等不同的算法, 这些算法都极大的丰富了 Krylov 子空间算法的内容. 预条件技术的发展使 Krylov 子空间方法更加完善, 特别是 J. A. Meijerink 和 H. A. van der Vorst[11] 等人不完全分解预条件子方面的工作极大的推动了 Krylov 子空间迭代算法的发展.

值得一提的是目前将求解线性系统的方法严格分为直接法和迭代法已经不准确, 对大规模问题来说, 往往会将这两类方法结合起来使用, 最典型的例子就是系数矩阵的不完全分解可以作为迭代法的预条件子. 另外, 在 SuperLU 软件包中, 在得到的近似解精度不够的情况下, 也会采用几步迭代来修正近似解. 此外, 许多直接法的策略可以用来为迭代算法构造预条件子. 因此很多学者都研究如何将直接法和迭代法结合起来构造多水平的求解算法. 下面我们就简单介绍下本文所涉及的几种特殊形式的稀疏线性系统.

§1.2 位移线性系统

记 A 为一 n 阶非奇异方阵，实数 α 为位移，其中 α 使 $A+\alpha I$ 也为非奇异的，我们考虑下面的线性系统

$$Ax = b, \tag{1.2}$$

和

$$\hat{A}x = b, \tag{1.3}$$

其中 $\hat{A} = A + \alpha I$, α 为某些指定的参数. 我们把 (1.2)(1.3) 统称为位移线性系统. 其中 (1.2) 为母系统, A 为母矩阵, 系统 (1.3) 为子系统 (或者附加系统), $\hat{A}$ 为子矩阵. 位移线性系统问题来源于科学计算的很多领域, 譬如 QCD 问题 [12, 13],

用 Tikhonov-Phillips 正则化来求解病态最小二乘问题 [14] 也会产生这样的线性系统, 另外在控制理论 [15] 和偏微分方程数值求解 [16] 都会产生这样的问题.

Krylov 子空间方法在求解位移线性系统时有着天然的优势, 因为对于同一初始向量 r, 母矩阵 A 和子矩阵 $\hat{A}$ 产生了相同的 Krylov 子空间, 也就是说

$$\mathcal{K}_m(\hat{A}, r) = \mathcal{K}_m(A, r) = span\{r, Ar, \cdots, A^{m-1}r\}.$$

一般来说可以把求解位移线性系统 Krylov 子空间方法分为两大类, 一类是基于短递推关系式而另外是基于长递推关系式.

基于短递推 Krylov 子空间方法不需要重新启动, 所以此类 Krylov 子空间方法在求解位移线性系统时显得非常有吸引力. 这一类型的方法近年来被人广泛研究, 例如当系数矩阵式对称正定时, J. van der Eshof 和 G L. G. Sleigpen 提出了一种 CG 类型的方法 [17] 很好的解决了这类位移线性系统, 而当系数矩阵对称不定的时候, R. Freund, G. Golub, 和 N. Nachtigal 给出了 TFQMR [18] 算法, A. Frommer 给出了 BICGstab [19] 算法.

对于基于长递推关系式的 Krylov 子空间迭代方法, 例如 GMRES [20], 由于建立新的基向量一般都会涉及到前面所有的基向量, 所以必须存储所有的基向量, 这样就工作量和存储量就会随着迭代的步数增加. 为了降低计算量和存储量, 特别对大规模问题, 重新启动是必须的. 但是对于位移线性系统来说, 重新启动会带来新的困难, 因为重新启动后母系统和子系统所对应的 Krylov 子空间有可能不再相同. 只有当每次重新启动的子母系统的初始向量都是平行的时候, 子母系统才能在同一个子空间中求解, 从而提高计算效率. 当用 FOM(Full Orthogonalization Method)[21] 来求解位移线性系统时, V. Simoncini[22] 发现子母系统的残向量都是平行的, 因此把当前的残量作为下一次重新启动的初始向量是非常自然和有效的. 原始的重新启动 GMRES 方法在求解位移线性系统时是不效率的, 因为 GMRES 方法是把当前产生的残量作为下一次重新启动的初始向量, 对于子母系统来说, 新产生的 Krylov 子空间不再是同一个子空间. 为了克服这一困难也就是为了保证子母系统产生残量的共线, 从而使子母系统重新启动后的 Krylov 子空间保持一致，Frommer 和 Glässner [23] 给出了一种 GMRES 方法的变形, 记为 SGMRES, 首先建立母系统的 Krylov 子空间并对其求解, 而子系统的解是通过强行的使子系统产生的残量和母系统的残量平行所得到. 当 A 正实, $\alpha > 0$ 时, Frommer 和 Glässner 证明了他们的所提出的 SGMRES[23] 方法对于子系统和母系统都是收敛的.

SGMRES 方法尽量能够使子母系统所对应的残向量都平行, 但是由于重新启动, 收敛速度变得缓慢, 受到求解线性系统的增广压缩重新启动 GMRES-E, GMRES-DR [24, 25] 技术的启发, 对于位移线性系统, G. Gu [26] 提出一种重新启动 GMRES 方法的变形, 每次重新启动时, 把调和 Ritz 向量添加到求解空间里去. R. B. Morgan [27] 也对 GMRES-DR 变形使之能够适用于位移线性系统, 特别是 QCD 问题. 当已经得知了矩阵小特征值所对应的近似特征向量时, 这样的策略是行之有效的. 不得不指出的是, 当所涉及的矩阵是高度非正规 [28, 29], 或者系数矩阵没有和 0 相对接近的特征值时, 又或者求解系数矩阵的特征问题代价很高的时候 [24], 这样的策略是不可取的.

§1.3 Sylvester 方程

把形如

$$AX + XB = C, \tag{1.4}$$

的矩阵方程成为 Sylvester 方程, 其中其中 $A \in \mathcal{R}^{m\times m}$, $B \in \mathcal{R}^{n\times n}$, $X \in \mathcal{R}^{m\times n}$, 特别的当 $m = n$, $B = A^T$, $C = C^T$, 方程 (1.4) 称为 Lyapunov 方程.

记 $X = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$, $C = (c_1, c_2, \cdots, c_n)$, $vec(X) = (x_1^T, x_2^T, \cdots, x_n^T)^T$, $vec(C) = (c_1^T, c_2^T, \cdots, c_n^T)^T$, 那么 Sylvester 方程 (1.4) 等价于下面的线性方程组

$$\mathscr{A} vec(X) = vec(C), \tag{1.5}$$

其中 $\mathscr{A} = I_n \otimes A + B^T \otimes I_m \in \mathcal{R}^{mn\times mn}$, 这里 $\otimes$ 表示 Kronecker 积. 上述把矩阵方程转化为线性方程组的过程我们称为线性化, 从方程 (1.5) 易知, 当

$$\lambda(A) \cap \lambda(B) = \emptyset$$

时, Sylvester 方程 (1.4) 有唯一解. 一般来说线性化过程只存在理论价值, 因为它把原问题的规模扩大了很多倍, 实际上求解 Sylvester 方程时, 都不采用这样的策略.

当问题的规模比较小时, 我们可以选择很多直接法来求解上述矩阵方程, 譬如 Bartels-Stewart 方法 [32], Hessenberg-Schur 方法 [33, 34], 这一类方法的主要思想是将原系统转化为一个特殊的可以用向前或者向后替代来求解的线性系统.

迭代法在求解线性系统的最有效的手段之一, 近年来, 对于 Sylvester 方程, 一些行之有效的迭代法也逐渐被提出来, 见文献 [35, 36, 37, 38]. 最近 F. Ding 和 T. W. Chen [39, 40, 41] 对成对的矩阵方程以及一般的矩阵方程组讨论了梯度迭代方法. 对于 Sylvester 方程 (1.4), 梯度迭代方法采用分级识别来求解方程的近似解, 同时 [39, 40, 41] 也分析了此方法的收敛条件, 在某些假设条件下, 这种方法是收敛的.

§1.4 鞍点问题

考虑下面的 2×2 块的稀疏线性方程组

$$\begin{pmatrix} A & B_1^T \\ B_2 & -C \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}, \quad or\ \ \mathcal{A}u = f \tag{1.6}$$

其中 $A \in \mathcal{R}^{n\times n}, B_1, B_2 \in R^{m\times n}, -C \in R^{m\times m}$, 并且 $n \geq m$, 规定 $A \neq 0$, $B_1 \neq 0$, $B_2 \neq 0$. 如果线性系统 (1.6) 系数矩阵中的块 A, B_1, B_2, C 满足下面一个或者多个条件, 我们称之为鞍点问题.

A1. A 对称: $A = A^T$

A2. A 的对称部分 $H = \frac{1}{2}(A + A^T)$ 是对称正定的

A3. $B_1 = B_2$

A4. C 是对称半定的.

A5. $C = 0$

鞍点问题来自科学和工程中的很多领域, 譬如约束最优化, 计算流体力学, 电冶金学等等, 参照文献 [42]. 鞍点问题的求解方法分为两大类, 分别是 Segregated 方法和 Coupled 方法, 顾名思义, Segregated 方法就是分开的求解未知量 x 和 y, 一般来说先求 x 再求 y. 这类方法包括 Schur complement reduction[43], Null space 方法 [44], Uzawa-type 方法等等 [45, 46, 47]. 而 Coupled 方法是把 x, y 当做一个整体来求解, 这一类方法包括 Krylov 子空间方法, 定点迭代方法等等, 参见文献 [42].

因为 $\mathcal{A}$ 通常是大规模并且稀疏的, 所以用上述方法求解鞍点问题的收敛速度可能相当缓慢. 在大多数情况下, 预条件子的作用往往比所采用的迭代方法重要. 近些年来, 在寻找高效的预条件子很多学者做了大量的工作, 并且给出了许多行之有效的预条件子, 例如块对角 (块三对角) 预条件子 [48, 49, 50], 约束预条件子 [51, 52], 以及其他一些预条件技术. Benzi 和 Golub 根据白中治所给的 HSS 迭代 [53] 提出了一种 HSS 预条件子 [54], 对于一般的鞍点问题, 当采用 HSS 预条件技术来求解时, 文献 [54, 55] 详细分析了预条件后矩阵谱的性质. 根据文献 [56] 所提出的一种新的分裂, Pan 详细分析了由此得到的预条件子.

本文主要工作就是针对上述几种特殊的稀疏线性系统, 分别研究了其求解的快速有效的数值算法. 在第二章我们给出了一种新的添加误差向量重新启动 GMRES 方法来求解线性位移系统, 第三章针对系数矩阵是块三对角形式时, 提出并且简单分析了一种组合的切频率过滤预条件子, 通过数值试验描述了了这种

预条件子的可行性. 在第四章我们给出了求解 Sylvester 方程的一种预条件的梯度迭代算法, 分析了算法收敛性, 数值试验表明新的算法比梯度迭代算法要收敛的快, 并且我们通过数值试验描述了步长参数对算法的影响. 在第五章, 针对鞍点问题, 根据一种分裂迭代格式, 我们给出了一种分裂迭代预条件子, 分析了预条件后矩阵谱在参数变化时的聚集性质, 通过数值试验验证我们的理论.

§1.5 本文的一些记号

下面给出本文出现的一些记号

- $\mathcal{R}^{m\times n}(\mathcal{C}^{m\times n})$, 表示 m 行 n 列实 (复) 矩阵的全体
- $\mathcal{R}^{n}(\mathcal{C}^{n})$, 所有实 (复)$n$ 维列向量的全体
- $\mathcal{K}_m(A,v)=span\{v,Av,\cdots A^{m-1}v\}$, 表示由 A 和 r 生成的 m 维 Krylov 子空间.
- $A^*(A^T)$, 表示矩阵 A 的共轭转置 (转置)
- A^{-1}, 表示 A 的逆矩阵
- I_n, 表示 n 阶单位矩阵
- e_i, 表示 n 阶单位矩阵的第 i 列
- $||\cdot||$, 表示欧几里得向量范数以及从属的矩阵范数
- $||x||_A$, 表示向量 x 的 A 范数, 当 A 对称正定时候为 $\sqrt{x^*Ax}$
- $\rho(A)$, 表示矩阵 A 的谱半径
- $\bigotimes$, 表示矩阵的 kronecker 乘积此外为了方便, 本人了还采用了一些 Matlab 中的记号.