

南京航空航天大学
论文集

(一九九九年)

第 17 册

(理学院)

南京航空航天大学科技部编

二〇〇〇年三月

理 学 院



目 录

计算数学教研室(9 篇)

求解大规模矩阵问题的 Krylov 子空间方法	戴 华
线性方程组数值解法的若干进展	戴 华
求解广义特征值反问题的数值方法	宋琦、戴华
An algorithm for symmetric generalized inverse eigervalue problems	戴 华 H
Numerical methods for solving multiparameter eigenvalue problems	戴 华 H
A New Efficient method for solving Nonlinear Programming problems with Inequality Constraints	倪 勤
Internet 最优化软件发展概况	倪 勤
An Adaptive Block QMRIOM(q) method for Solving Unsymmetric Linear Systems with Multiple Right - hand Sides ...	王正盛
带极端特征向量的重新开始 GMRES 算法	王正盛、钟宝江 H

应用数学教研室(3 篇)

数理课程中的美育思考	古志鸣
广义幂律过程的一个拟合优度检验法	杨纪龙、叶尔骅、白志茂 H
幂律过程拟合优度检验的功效比较	叶尔骅、白志茂、杨纪龙 H

基础数学教研室(2 篇)

Jacobi 矩阵的逆特征值问题	徐海燕 J
组合桁架结构动力学优化设计及模态综合	汪晓虹、周传荣 H



物理教研室(13 篇)

- 灯泵钛宝石激光性能的实验研究 张永梅 H
- 光激励 SMA 对复合材料振动影响的研究 马军艳、赵志敏、姚红兵 H
- 光纤复合材料损伤探测的光学显示技术 赵志敏等 H
- 复合材料损伤探测的光电检测系统 赵志敏等 H
- 反射式动栅光纤传感器及应用 孙欣、赵志敏等 H
- 磨粒特征参数的筛选及权分析 吴惠祥、朱剑英、左洪福
- ELEMENTARY EXCITATIONS IN MAGNETICALLY
ORDERED SYSTEMS WITH ORBITAL DEGENERACY
..... A. Joshi, M. Ma, F. Milla, 施大宁
- GROUND STATE AND EXCITATIONS OF
A SPIN CHAIN WITH ORBITAL DEGENERACY Y. Q. Li, M. Ma, 施大宁
- THE EFFECT OF NONMAGNETIC DOPING
ON THE D - WAVE HEAVY FERMION SUPERCONDUCTIVITY
..... 施大宁、李正中 H
- 漂浮基空间机械臂惯性轨迹跟踪的分解运动
- 增广自适应控制算法 陈 力
- 一类空间机械臂系统的自适应控制与鲁棒控制 陈 力 H
- The adaptive control of free - floating space
manipulator with uncertain parameter 陈 力
- The Adaptive Control Schemes of Resolved motion
of space - based manipulator with PRISMATIC
joint and uncertain parameter 陈 力

求解大规模矩阵问题的 Krylov 子空间方法*

戴 华

(南京航空航天大学理学院 南京, 210016)

摘要 求解大规模矩阵问题包括线性方程组和特征值问题数值方法的理论研究、算法设计和软件研制是当今计算数学和科学与工程计算研究领域的重大课题, 是大规模科学与工程计算的基础和重要组成部分, 其研究工作极为活跃, 并取得了许多重大进展。本文概述这些进展的一部分。评述的内容涉及线性方程组和特征值问题的 Krylov 子空间方法, 提出一些有待进一步研究的问题。

关键词: 线性方程组; 特征值问题; Krylov 子空间方法

1 引言

大规模矩阵问题包括线性方程组、矩阵特征值问题等数值解法的理论研究、算法设计和软件研制是当今计算数学和科学与工程计算研究的重大课题, 是大规模科学与工程计算的基础和重要组成部分, 其研究具有重要的理论意义和广泛的应用价值。尤其是其中大型非对称矩阵问题的数值计算, 因其理论上的复杂性, 导致在算法的理论研究和软件设计中产生了许多本质的困难。问题的挑战性吸引了国内外许多数值分析专家从事该领域的研究, 并取得了许多重大进展。

求解线性方程组和矩阵特征值问题的 Krylov 子空间方法可以追溯到五十年代初 Lanczos^[1,2]、Arnoldi^[3]、Hestenes 和 Stiefel^[4] 的工作。但在其后二十年, 人们一直认为这类方法是数值不稳定的, 很少用于实际计算。直到七十年代初 Paige 在其著名的博士论文^[5] 中重新研究了 Lanczos 方法以及八十年代初 Saad^[6] 重新研究了 Arnoldi 方法, 才使人们重新认识了这两个方法。之后, 人们又做了大量的理论分析和数值试验, 充分认识到 Krylov 子空间方法是求解大型线性方程组和大型矩阵特征值问题的一类最有效的方法。本文概述 Krylov 子空间方法的若干进展, 并提出一些有待进一步研究的问题。

2 求解大型线性方程组的 Krylov 子空间方法

对线性方程组

$$Ax = b \quad (2.1)$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, 设 $x_0 \in \mathbb{R}^n$ 是(2.1)解的初始估计, $r_0 = b - Ax_0$ 是初始残量。称 $K_k(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0\}$ 为由 A 和 r_0 产生的 Krylov 子空间。Krylov 子空间方法求(2.1)的具有如下形式的近似解

* 国家自然科学基金、江苏省自然科学基金、江苏省“333 工程”基金和江苏省“青蓝工程”基金资助项目。

$$x_k \in x_0 + K_k(A, r_0) \quad (2.2)$$

并且使残量 $r_k = b - Ax_k$ 满足 Galerkin 条件

$$r_k \perp L_k \quad (2.3)$$

其中 L_k 是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个子空间, 或使残量 r_k 的范数极小化, 即

$$\|r_k\| = \min_{x \in x_0 + K_k(A, r_0)} \|b - Ax\| \quad (2.4)$$

用(2.2)和(2.3)定义近似解 x_k 的 Krylov 子空间方法称为正交残量 (OR) 方法。用 V_k 和 W_k 分别表示子空间 $K_k(A, r_0)$ 和 L_k 的基为列作成的矩阵, OR 方法可行的充要条件是 $W_k^T A V_k$ 非奇异。OR 方法产生的近似解为

$$x_k = x_0 + V_k (W_k^T A V_k)^{-1} W_k^T r_0 \quad (2.5)$$

用(2.2)和(2.4)定义近似解 x_k 的 Krylov 子空间方法称为极小残量 (MR) 方法。如果最小二乘问题

$$\min_{y \in \mathbb{R}^k} \|r_0 - A V_k y\| \quad (2.6)$$

的解为 y , 则 MR 方法产生的近似解为

$$x_k = x_0 + V_k y \quad (2.7)$$

如果在(2.3)中取 $L_k = AK_k(A, r_0)$, 则 OR 方法产生的近似解与 MR 方法产生的近似解相同^[1]。在(2.3)中选取不同的 L_k 或在(2.4)中选取不同的范数可导出不同的算法。

2.1 对称正定线性方程组的共轭梯度法

1952 年 Hestenes 和 Stiefel^[4]提出了求解对称正定线性方程组的共轭梯度法(CG)如下:

算法 2.1 CG 算法

1) 选取初始近似解 x_0 , 计算 $r_0 = b - Ax_0$, 令 $p_0 = r_0$;

2) 对 $k = 0, 1, 2, \dots$, 计算

$$2.1) \quad \alpha_k = (r_k, r_k) / (A p_k, p_k)$$

$$2.2) \quad x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$2.3) \quad r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$$

$$2.4) \quad \beta_k = (r_{k+1}, r_{k+1}) / (r_k, r_k)$$

$$2.5) \quad p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

共轭梯度法可以充分利用矩阵 A 的稀疏性, 每次迭代的主要计算量是向量之间的运算。共轭梯度法是一个 Krylov 子空间方法。实际上, 共轭梯度法是在向量范数 $\|x\|_A = (Ax, x)^{1/2}$ 下的 MR 方法^[1], 近似解 x_k 满足如下极小化性质

$$\|b - Ax_k\|_{A^{-1}} = \min_{x \in x_0 + K_k(A, r_0)} \|b - Ax\|_{A^{-1}} \quad (2.8)$$

并且^[8]

$$\|x - x_k\|_4 \leq 2\|x - x_0\|_4 \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \quad (2.9)$$

其中 $\kappa = K(A) = \lambda_{\max}(A) / \lambda_{\min}(A)$ 表示 A 的谱条件数。

2.2 对称不定线性方程组的 SYMMLQ 算法和 MINRES 算法

四十多年来,人们一直设法将 CG 方法推广到对称不定或非对称线性方程组。对对称不定或非对称矩阵 A , $\|\cdot\|_{A^{-1}}$ 一般不再是范数,因此人们通常用如下极小化性质代替(2.8)

$$\|b - Ax_k\|_2 = \min_{x \in r_0 + K_k(A, r_0)} \|b - Ax\|_2 \quad (2.10)$$

1975 年 Paige 和 Saunders^[9]提出了求解对称不定线性方程组的数值稳定的 SYMMLQ 算法和 MINRES 算法。这两个算法利用如下对称 Lanczos 过程^[1]产生 $K_k(A, r_0)$ 的一组标准正交基。

算法 2.2 对称 Lanczos 算法

1) 计算 $\beta = \|r_0\|_2$, $v_1 = r_0 / \beta$, 置 $\beta_1 = 0$, $v_0 = 0$;

2) 对 $j = 1, 2, \dots, k$ 计算

$$2.1) \quad w_j = Av_j - \beta_j v_{j-1}$$

$$2.2) \quad \alpha_j = (w_j, v_j)$$

$$2.3) \quad w_j := w_j - \alpha_j v_j$$

$$2.4) \quad \beta_{j+1} = \|w_j\|_2. \text{ 如果 } \beta_{j+1} = 0, \text{ 置 } k:=j, \text{ 结束; 否则 } v_{j+1} = w_j / \beta_{j+1}.$$

记 $V_k = [v_1, \dots, v_k]$,

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \beta_k \\ 0 & \cdots & 0 & \beta_k & \alpha_k \end{bmatrix}, \quad T_k^{(e)} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \beta_k \\ 0 & \cdots & 0 & \beta_k & \alpha_k \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \beta_{k+1} \end{bmatrix}$$

则

$$AV_k = V_k T_k + \beta_{k+1} v_{k+1} e_k^T = V_{k+1} T_k^{(e)} \quad (2.11)$$

并且 $v_1, \dots, v_k$ 是 Krylov 子空间 $K_k(A, r_0)$ 的一组标准正交基。

SYMMLQ 算法是在 OR 方法中取 $L_k = K_k(A, r_0)$, $W_k = V_k$, 则 $W_k^T AV_k = T_k$, $x_k = x_0 + \beta V_k T_k^{-1} e_1$; MINRES 算法是在(2.10)意义下的 MR 方法, 由(2.11)式, (2.6)化为

$\min_{y \in \mathbb{R}^n} \|r_0 - AF_k y\|_2 = \min_{y \in \mathbb{R}^n} \|\beta_1 - T_k^{(c)} y\|_2$, 则容易求得 y , 并由(2.7)式即得近似解 x_k 。

SYMMLQ 算法和 MINRES 算法均以三项递推公式进行计算, 具有计算量小、存储量少的优点, 并且 MINRES 算法的残量范数单调下降。这两个算法至今仍是求解大型对称不定线性方程组的最有效方法。

对具有相同系数矩阵而具有不同右端项的大型线性方程组集 $Ax_i = b_i (i=1, \dots, m)$, 对所有方程组 $AX=B$ (其中 $X=[x_1, \dots, x_m], B=[b_1, \dots, b_m]$) 采用块方法同时进行迭代比对各个方程组 $Ax_i = b_i$ 使用通常的迭代法更有效。O'Leary^[10] 提出了求解大型对称线性方程组集的块 CG 方法, 并利用块 Lanczos 过程^[11]将 SYMMLQ 算法推广到求解 $AX=B$, 给出了块 Lanczos 方法。但是对所有不同的右端项由块 Lanczos 方法产生的序列收敛速度一般是不同的, 并且残量范数未必单调下降。一个有效的块方法应该能判断、自适应地收缩收敛的方程组, 但块 Lanczos 方法的收缩问题一直未解决。作者^[12]利用收敛性判据识别和收缩收敛的方程组, 提出了求解大型对称线性方程组集的自适应块 Lanczos 方法。为了解决块 Lanczos 方法中残量范数的振荡, [12]提出了 MINRES 方法的一个块版本——块 MINRES 方法, 描述了块 MINRES 方法的收缩技术, 并且建立了块 Lanczos 方法与块 MINRES 方法之间的关系。

2.3 GMRES 及相关算法

对非对称矩阵 A , Arnoldi^[13]提出了产生 Krylov 子空间 $K_k(A, r_0)$ 的一组标准正交基 $v_1, \dots, v_k$ 的方法, 即 Arnoldi 算法。该算法可概述如下:

算法 2.3 Arnoldi 算法

1) 计算 $\beta = \|r_0\|_2, v_1 = r_0 / \beta$;

2) 对 $j = 1, 2, \dots, k$ 计算

$$2.1) \quad w_j = Av_j$$

2.2) 对 $i = 1, 2, \dots, j$, 计算

$$h_{ij} = v_i^T w_j,$$

$$w_j := w_j - h_{ij} v_i,$$

2.3) $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$, 如果 $h_{j+1,j} = 0$, 置 $k:=j$, 结束; 否则 $v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j}$.

记 $V_k = [v_1, \dots, v_k]$,

$$H_k = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \cdots & h_{2k} \\ 0 & h_{32} & h_{33} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & h_{k-1,k} \\ 0 & \cdots & 0 & h_{k,k-1} & h_{kk} \end{bmatrix}, \quad H_k^{(c)} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \cdots & h_{2k} \\ 0 & h_{32} & h_{33} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & h_{k-1,k} \\ 0 & \cdots & 0 & h_{k,k-1} & h_{kk} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & h_{k+1,k} \end{bmatrix}$$

则

$$AV_k = V_k H_k + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T = V_{k+1} H_k^{(e)} \quad (2.12)$$

$v_1, \dots, v_k$ 是 Krylov 子空间 $K_k(A, r_0)$ 的一组标准正交基。

取 $L_k = K_k(A, r_0)$, $W_k = V_k$, 则 $W_k^T AV_k = H_k$, 由 OR 方法可产生完全正交化方法^[13], 该方法所得近似解为 $x_k = x_0 + \beta V_k H_k^{-1} e_1$ 。

在(2.4)中取 2-范数, 则由 MR 方法可产生 Axelsson-Least-Squares 算法^[14], ORTHODIR 算法^[15], GCR 算法^[16]和 GMRES 算法^[17]。理论上这四个算法是等价的。从数值稳定性、计算量和存储量方面考虑, GMRES 算法是值得推荐的。该方法利用(2.12)将最小二乘问题(2.4)化为 $\|r_k\|_2 = \min_{y \in \mathbb{R}^k} \| \beta e_1 - H_k^{(e)} y \|_2$, 并由(2.7)确定近似解。理论上已证明对正实矩阵,

GMRES 算法收敛^[17], 但其收敛率与谱分布情况密切相关。

由于 Arnoldi 过程具有递推关系, 其计算量和存储量较大。目前已有 GMRES 算法的多个实用变形, 其中应用最广泛的是重新开始 GMRES 算法^[17], 但重新开始 GMRES 算法可能收敛很慢或出现驻留。为了克服这些缺点, [18]提出了混合 GMRES 算法; 而[19]提出了利用特征向量的重新开始 GMRES 算法。最近, 钟宝江^[20]讨论了混合 GMRES 算法的有效实现。

对非对称线性方程组集 $AX=B$, Vital^[21]利用块 Arnoldi 过程, 提出了块 GMRES 方法。但是块 GMRES 方法的计算量和存储量都很大, 并且[21]没有解决块 GMRES 方法的收缩问题。作者在[22]中将非对称线性方程组集 $AX=B$ 对称化为

$$\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y \\ X \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

并将[12]中块 Lanczos 方法和块 MINRES 方法应用于求解对称线性方程组集(2.13), 提出了求解非对称线性方程组集的块双对角化 Lanczos 方法和块双对角化 MINRES 方法, 并且解决了这两个方法和块 GMRES 方法的收缩问题。块双对角化 Lanczos 方法和块双对角化 MINRES 方法具有计算量和存储量小的优点。大量的数值试验^[23]均显示块双对角化 Lanczos 方法和块双对角化 MINRES 方法优于块 GMRES 方法。

2.4 Lanczos 双正交化方法与 MQR 方法

Lanczos^[11]提出了产生 $K_k(A, r_0)$ 和 $K_k(A^T, r_0)$ 的一组双正交基 $v_1, \dots, v_k$ 和 $w_1, \dots, w_k$ 的方法, 即非对称 Lanczos 算法。该算法可描述如下:

算法 2.4 非对称 Lanczos 算法

1) 计算 $\beta = \|r_0\|_2$, $v_1 = r_0 / \beta$, $w_1 = r_0 / \beta$, 置 $\beta_1 = \delta_1 = 0$, $v_0 = w_0 = 0$;

2) 对 $j=1, 2, \dots, k$ 计算

$$2.1) \quad \alpha_j = (Av_j, w_j)$$

$$2.2) \quad \hat{v}_{j+1} = Av_j - \alpha_j v_j - \beta_j v_{j-1}$$

$$2.3) \quad \hat{w}_{j+1} = A^T w_j - \alpha_j w_j - \delta_j w_{j-1}$$

$$2.4) \quad \delta_{j+1} = \|(\hat{v}_{j+1}, \hat{w}_{j+1})\|_2^2, \text{ 如果 } \delta_{j+1} = 0, \text{ 结束; 否则}$$

$$2.5) \quad \beta_{j+1} = (\hat{v}_{j+1}, \hat{w}_{j+1}) / \delta_{j+1}$$

$$2.6) \quad v_{j+1} = \hat{v}_{j+1} / \delta_{j+1}$$

$$2.7) \quad w_{j+1} = \hat{w}_{j+1} / \beta_{j+1}$$

记 $V_k = [v_1, \dots, v_k]$, $W_k = [w_1, \dots, w_k]$,

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \delta_2 & \alpha_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \beta_k \\ 0 & \cdots & 0 & \delta_k & \alpha_k \end{bmatrix}, \quad T_k^{(c)} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \delta_2 & \alpha_2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \beta_k \\ 0 & \cdots & 0 & \delta_k & \alpha_k \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \delta_{k+1} \end{bmatrix}$$

则

$$AV_k = V_k T_k + [0, \dots, 0, \hat{v}_{k+1}] = V_{k+1} T_k^{(c)}, \quad A^T W_k = W_k T_k^T + [0, \dots, 0, \hat{w}_{k+1}] \quad (2.14)$$

V_k 和 W_k 满足双正交关系 $W_k^T V_k = I$, 并且 $\text{span}(V_k) = K_k(A, r_0)$, $\text{span}(W_k) = K_k(A^T, r_0)$.

Saad^[23]取 $L_k = K_k(A^T, r_0)$, 利用非对称 Lanczos 算法, 由 OR 方法导出了求解(2.1)的 Lanczos 双正交化算法。但仍存在两方面的问题: 一是如何有效地计算收敛性判据; 二是如何将非对称 Lanczos 过程与求解非对称三对角方程组有机结合起来。[24]给出了计算 Lanczos 双正交化算法收敛性判据的一个有效方法, 并且利用三对角矩阵的 LQ 分解和导出的收敛性判据将非对称 Lanczos 过程与求解三对角方程组巧妙地结合起来, 提出了求解(2.1)的 UNSYMMMLQ 方法。对对称线性方程组, UNSYMMMLQ 方法等价于 SYMMMLQ 方法, 所以 UNSYMMMLQ 方法可看作 SYMMMLQ 方法在非对称情形的推广。

MR 方法求 y 使得

$$\|r_k\|_2 = \min_{y \in \mathbb{R}^n} \|V_{k+1}(\beta_1 - T_k^{(c)} y)\|_2 \quad (2.15)$$

从而得到近似解 $x_k = x_0 + V_k y$ 。因为 V_{k+1} 不是列正交规范矩阵, 求解最小二乘问题(2.15)的计算量和存储量都较大。Freund 和 Nachtigal^[25]建议求 y 使得

$$\min_{y \in \mathbb{R}^n} \|\beta_1 - T_k^{(c)} y\|_2 \quad (2.16)$$

给出了求解(2.1)的 QMR 算法。当矩阵 A 对称时, QMR 算法等价于 MINRES 算法, QMR 算法可视为 MINRES 算法在非对称情况的推广。

如果 $(\hat{v}_{j+1}, \hat{w}_{j+1}) = 0$, 非对称 Lanczos 算法发生中断。为了解决这个问题, Parlett 等^[26]和 Freund 等^[27]分别提出了两个前瞻策略。但[26]的计算工作量较大, 并且不易推广到块格式。Freund 和 Malhotra^[28]将 QMR 算法推广到求解大型非对称线性方程组集 $AX=B$, 给出了块 QMR 算法。

3 矩阵特征值问题的 Krylov 子空间方法

对矩阵特征值问题

$$Ax = \lambda x \quad (3.1)$$

其中 A 是 n 阶矩阵, 记 K 是 C^n 中的一个 k 维子空间。对于空间 K 的正交投影方法就是求问题(3.1)的近似特征向量 $\tilde{\phi} \in K$ 和近似特征值 $\tilde{\lambda}$ 使得

$$A\tilde{\phi} = \tilde{\lambda}\tilde{\phi} \perp K \quad (3.2)$$

如果子空间 K 的标准正交基 $v_1, \dots, v_k$ 为列所构成的矩阵记为 $V_k = [v_1, \dots, v_k]$, 则

$$\tilde{\phi} = V_k y \quad (3.3)$$

其中 $y \in C^k$, $\tilde{\lambda}$ 和 y 是如下 k 维特征值问题的特征对

$$V_k^H A V_k y = \tilde{\lambda} y \quad (3.4)$$

我们称 $\tilde{\lambda}$ 为 Ritz 值, $\tilde{\phi} = V_k y$ 为相应的 Ritz 向量。

对于空间 K 的正交投影方法就是用 Ritz 对 $(\tilde{\lambda}, \tilde{\phi})$ 逼近 A 的特征对 (λ, x) 。随着子空间 K 的维数增大, 残量 $r = A\tilde{\phi} - \tilde{\lambda}\tilde{\phi}$ 的范数会减小, 特别地, 当 $k = n$ 时, Ritz 对就是问题(3.1)的特征对。实际上, 如果残量范数充分小, 通常取 Ritz 对 $(\tilde{\lambda}, \tilde{\phi})$ 作为近似特征对。

子空间 K 的最佳选择之一是由 A 和 v_1 产生的 Krylov 子空间, 即 $K = K_k(A, v_1) = \text{span}(v_1, Av_1, \dots, A^{k-1}v_1)$, 由此导出的方法称为 Krylov 子空间方法。从稳定性和有效性考虑, 需要构造 Krylov 子空间 $K_k(A, v_1)$ 的一组标准正交基 $v_1, \dots, v_k$, 并且使 k 阶矩阵 $V_k^H A V_k$ 的特征值问题 (3.4) 容易求解。

3.1 对称矩阵的 Lanczos 方法

对对称 (或 Hermite) 矩阵 A , 利用 Lanczos 算法 (即算法 2.2) 可产生 Krylov 子空间 $K_k(A, v_1)$ 的一组标准正交基 $v_1, \dots, v_k$, 并且 $V_k^H A V_k = T_k$ 为对称三对角矩阵。计算 T_k 的特征值作为 A 的特征值的近似, 并用相应的 Ritz 向量作为 A 的特征向量的近似。这就是求解对称矩阵特征值问题的 Lanczos 方法。

Kaniel^[29]首先给出了 Lanczos 方法中 Ritz 值的一种收敛性估计, 不过其证明有错误; Paige^[31]重新研究了这一问题, 不仅给出了 Ritz 值的收敛性估计, 而且给出了 Ritz 向量的收敛性估计; Saad^[30]在 Paige 工作的基础上对 Ritz 值的收敛性给出了比 Paige 更简单的估计。

如果算法 2.2 在没有舍入误差的情况下执行, 则所得到的向量 $v_1, \dots, v_k$ 是相互正交的, 并且至多 n 步必然终止。但是在出现舍入误差的情况下, 计算得到的向量 $v_1, \dots, v_k$ 会失去正交性。因此, 长期以来人们一直认为 Lanczos 方法是数值不稳定的。直到 1971 年, Paige^[31]通过仔细的舍入误差分析, 发现了失去正交性恰与近似特征值的精度提高有关。之后, 经过大量的理论分析与数值试验, 人们充分认识到 Lanczos 方法是求解大型稀疏对称矩阵特征值问题的最有效方法之一。然而, 对于 A 的某一指定的特征值 λ , k 究竟取

多大时 T_k 才有与其非常靠近的特征值? 一般说来, 这取决于 A 的特征值的分布、 λ 与 A 的其它特征值的分离程度以及 λ 在 A 的谱区间内的位置。通常对位于谱区间两端并且分离较好的特征值 λ , 当 $k \ll n$ 时 T_k 的特征值中就含有 λ 的很好近似值。

在实际计算中, 当 k 较大时, 由于 $\{v_i\}$ 的正交性逐渐失去, 常会发生 A 的同一特征值被反复计算多次的现象。为了避免这一现象的产生, [31] 提出了带选择正交化的 Lanczos 方法。

当矩阵 A 的阶数非常高时, 常取一适当的 k , 迭代使用 Lanczos 方法 (即重新开始 Lanczos 方法)。但其收敛速度与初始向量的选取有关, [32] 利用 Chebyshev 多项式给出了加速重新开始 Lanczos 方法的一个技巧, 提出了迭代 Chebyshev-Lanczos 方法; [33] 提出了隐式重新开始 Lanczos 方法。

当要求的特征值密集或其中有重特征值时, Lanczos 方法及其变形的有效性与可靠性会下降。为了克服这个缺点, Cullum 与 Donath^[34]、Underwood^[35] 分别提出了求解对称矩阵特征值问题的块 Lanczos 方法, 并且 [35] 和 [30] 研究了块 Lanczos 方法中 Ritz 对的收敛性, 其收敛率与初始向量有关。[36] 给出了选取初始向量的一种策略, 提出了块 Chebyshev-Lanczos 方法以加速块 Lanczos 方法的收敛性。目前, 该方法是求解大型稀疏对称矩阵部分极端特征对的最有效方法。

3.2 非对称矩阵的 Arnoldi 方法

对非对称矩阵 A , 利用 Arnoldi 算法 (算法 2.3) 可产生 Krylov 子空间 $K_k(A, v_1)$ 的一组标准正交基 $v_1, \dots, v_k$, 并且 $V_k^H A V_k = H_k$ 为上 Hessenberg 矩阵。求解非对称矩阵特征值问题 (3.1) 的 Arnoldi 方法^[3] 就是计算 H_k 的特征值作为 A 的近似特征值, 并用相应的 Ritz 向量作为 A 的近似特征向量。[6] 和 [37] 分别研究了 Arnoldi 方法的收敛性。

用 Arnoldi 算法构造 $K_k(A, v_1)$ 的标准正交基 $v_1, \dots, v_k$ 时, 需要把所有基向量都存储在内存中, 当 k 较大时, Arnoldi 方法的存储量很大甚至无法实现。为了保证快速收敛, 理论上 k 取越大越好; 实际上从存储量考虑又不能这样做。通常根据内存的能力取最大可能的 k 。对这样选取的 k , 用 Arnoldi 方法计算的 Ritz 值和 Ritz 向量未必满足精度要求。克服这个困难的办法是用一个 Ritz 向量或几个 Ritz 向量的线性组合代替 v_1 重复使用 Arnoldi 方法, 这个过程称为迭代 Arnoldi 方法或重新开始 Arnoldi 方法。重新开始 Arnoldi 方法的收敛速度可能很慢, [38]、[39] 和 [40] 提出利用 Chebyshev 多项式加速重新开始 Arnoldi 方法, 但至今尚无有效方法确定 Chebyshev 迭代中的参数。因此, 如何利用已积累的信息逐次重新构造更好的投影子空间是提高重新开始 Arnoldi 方法有效性的关键。[41] 提出了一种隐式重新开始 Arnoldi 方法。

对大型非对称矩阵 A , 当所要求的特征值密集时, 为了使 Arnoldi 方法收敛, $K_k(A, v_1)$ 的维数 k 会大到存储量和计算量令人无法接受的程度; 另一方面, 当 A 有重特征值时, 如何确定其重数及其对应的特征空间是数值计算中的一大难题, Arnoldi 方法在理论和算法上不能解决这一难题。为此, 作者^[42] 提出了块 Arnoldi 方法, 该方法不仅可以

求密集特征值,而且较 Arnoldi 方法具有更高的可靠性和有效性。之后, [43]进一步研究了块 Arnoldi 方法,并且[44]讨论了如何利用 Chebyshev 多项式加速块 Arnoldi 方法。

4 讨论

Krylov 子空间方法是求解大型稀疏线性方程组的一类有效算法,其收敛速度依赖于矩阵特征值或奇异值的分布。改善特征值或奇异值分布的方法称为预条件技术,即选取预条件矩阵 M 使 $M^{-1}A$ 尽可能接近于单位矩阵。通常的作法是令 M 在某种意义下接近 A 并且 M^{-1} 的计算易于实现或选取接近于 A^{-1} 的 M^{-1} 并且容易计算 M^{-1} 。如果选取好的预条件矩阵,各种 Krylov 子空间算法的计算效率没有多大差别,但如何识别并构造好的预条件矩阵是一个重要的研究课题。在这个领域已取得了一些进展^[9],但对高度非正规矩阵和对称不定矩阵,如何选取合适的预条件矩阵仍有待进一步研究。

用 Krylov 子空间方法求大型线性方程组近似解的逼近误差可以用迭代过程中的信息估计。但除了对一些特殊的矩阵,如对称正定矩阵、正实矩阵等外,对大多数 Krylov 子空间算法,给出理论误差界的问题尚未完全解决,有待进一步研究。

人们希望把预条件技术应用于求解特征值问题的 Krylov 子空间方法。Davidson 方法^[45]和广义 Davidson 方法^[46]都可以看作求解对称矩阵特征值问题的预条件方法,这些方法用算子 $N(\rho) = (M - \rho I)^{-1}(A - \rho I)$ 产生投影子空间,其中 ρ 是要求特征值的近似, M 是对称矩阵 A 的近似, $M - \rho I$ 可看作对 $A - \rho I$ 的预条件矩阵。[47]将 $N(\rho)$ 变换为对称矩阵 $H(\rho) = L^{-1}(A - \rho I)L^{-T}$, 其中 LL^T 是预条件矩阵 $M - \rho I$ 的 Cholesky 分解,并对 $H(\rho)$ 应用 Lanczos 方法,从而给出了预条件 Lanczos 方法。在此基础上,作者^[48]提出了预条件块 Lanczos 方法。对非对称矩阵,如何应用预条件技术提高 Krylov 子空间方法的收敛速度有待探讨。

参考文献

- [1] Lanczos C. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. J. Res. Nat. Bur. Stand. 45 (1950), 255-282
- [2] Lanczos C. Solution of systems of linear equations by minimized iterations. J. Res. Nat. Bur. Stand. 49 (1952), 33-53
- [3] Arnoldi W. E. The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem. Quart. Appl. Math. 9 (1951), 17-29
- [4] Hestenes M. R. and Stiefel E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. J. Res. Nat. Bur. Stand. 49 (1952), 409-436
- [5] Paige C. C. The computation of eigenvalues and eigenvectors of very large sparse matrices, Ph. D. thesis, University of London, 1971.
- [6] Saad Y. Variations on Arnoldi's method for computing eigenelements of large unsymmetric matrices. Lin. Alg. Appl. 34(1980), 269-295
- [7] Saad Y. and Schultz M. H. Conjugate gradient-like algorithms for solving nonsymmetric linear systems. Math. Comp. 44 (1985), 417-424

- [8] Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. PWS Publishing Company, 1996
- [9] Paige C. C. and Saunders M. A. Solution of sparse indefinite systems of linear equations. *SIAM J. Numer. Anal.* 12 (1975), 617-629
- [10] O'Leary D. P. The block conjugate gradient algorithm and related methods. *Lin. Alg. Appl.* 29 (1980), 293-322
- [11] Golub G. H. and Underwood R. The block Lanczos method for computing eigenvalues. In *Mathematical Software III*, ed. J.R. Rice, Academic Press, New York, 1977, 361-377
- [12] Dai Hua. Two algorithms for symmetric linear systems with multiple right-hand sides. CERFACS Tech. Report-TR/PA/98/17, France, 1998
- [13] Saad Y. Krylov subspace methods for solving large unsymmetric linear systems. *Math. Comp.* 37 (1981), 105-126
- [14] Axelsson O. Conjugate gradient type methods for unsymmetric and inconsistent systems of linear equations. *Lin. Alg. Appl.* 29 (1980), 1-16
- [15] Young D. M. and Jea K. C. Generalized conjugate-gradient acceleration of nonsymmetrizable methods. *Lin. Alg. Appl.* 34 (1980), 159-194
- [16] Eisentat S. C., Elman H. C. and Schultz M. H. Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations. *SIAM J. Numer. Anal.* 20 (1983), 345-357
- [17] Saad Y. and Schultz M. H. GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 7 (1986), 856-869
- [18] Nachtigal N. M., Reichel L. and Trefethen L. N. A hybrid GMRES algorithm for nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 13 (1992), 796-825
- [19] Morgan R. B. A restarted GMRES method augmented with eigenvectors. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 16 (1995), 1154-1171
- [20] Zhong Bao-jiang. Implementation of the hybrid GMRES algorithm using Householder transformations. *Trans. of NUAA*, 14 (1997), 146-152
- [21] Vital B. Etude de quelques methodes de resolution de problemes lineaires de grande taille sur multiprocesseur. Ph.D. thesis, Universite de Rennes, Rennes, France, 1990
- [22] Dai Hua. Block bidiagonalization methods for solving nonsymmetric linear systems with multiple right-hand sides. CERFACS Tech. Report-TR/PA/98/35, France, 1998
- [23] Saad Y. The Lanczos biorthogonalization algorithm and other oblique projection methods for solving large unsymmetric systems. *SIAM J. Numer. Anal.* 19 (1982), 485-506
- [24] 周树坚, 戴华. 求解大型非对称线性方程组的 UNSYMMLOQ 方法. *高等学校计算数学学报*, 10:2 (1989), 118-130
- [25] Parlett B. N., Taylor D. R. and Liu Z. A. A look-ahead Lanczos algorithm for unsymmetric matrices. *Math. Comp.* 44 (1985), 105-124
- [26] Freund R. W., Gutknecht M. H. and Nachtigal N. M. An implementation of the look-ahead Lanczos algorithm for non-Hermitian matrices. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 14 (1993), 137-158
- [27] Freund R. W. and Nachtigal N. M. QMR: a quasi-minimal residual method for non-Hermitian linear systems. *Numer. Math.* 60 (1991), 315-339
- [28] Freund R. W. and Malhotra M. A block QMR algorithm for non-Hermitian linear systems with multiple right-hand sides. *Lin. Alg. Appl.*, 254 (1997), 119-157

- [29] Kaniel S. Estimates for some computational techniques in linear algebra. *Math. Comp.* 20 (1966), 369-378
- [30] Saad Y. On the rates of convergence of the Lanczos and the block Lanczos methods. *SIAM J. Numer. Anal.* 17 (1980), 689-706
- [31] Parlett B. N. and Scott D. S. The Lanczos algorithm with selective orthogonalization. *Math. Comp.* 33 (1979), 217-238
- [32] 戴华, 周树荃. 求解大型对称特征值问题的迭代 Chebyshev-Lanczos 方法. *南京航空航天大学学报*, 18:4 (1986), 25-34
- [33] Calvetti D., Reichel L. and Sorensen D. C. An implicitly restarted Lanczos method for large symmetric eigenvalue problems. *ETNA*, 2 (1994), 1-21
- [34] Cullum J. and Donath W. E. A block Lanczos algorithm for computing the q algebraically largest eigenvalues and a corresponding eigenspace of large sparse real symmetric matrices. *Proc. of IEEE Conf. on Decision and Control*, Phoenix, Arizona, 1974, 505-509
- [35] Underwood R. R. An iterative block Lanczos method for the solution of large sparse symmetric eigenproblems. *Tech. Rep. STAN-CS-75-496*, Stanford University, 1975
- [36] 周树荃, 戴华. 求解大型对称特征值问题的块 Chebyshev-Lanczos 方法. *南京航空航天大学学报*, 21:4 (1989), 22-28
- [37] Jia Z. The convergence of generalized Lanczos methods for large unsymmetric eigenproblems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 16 (1995), 843-862
- [38] Saad Y. Chebyshev acceleration techniques for solving nonsymmetric eigenvalue problems. *Math. Comp.* 42 (1984), 567-588
- [39] Ho D. Tchebyshev acceleration technique for large scale nonsymmetric matrices. *Numer. Math.* 56 (1990), 721-734
- [40] Ho D., Chatelin F. and Bennani M. Arnoldi-Chebyshev method for large scale nonsymmetric matrices, *Math. Modelling and Numer. Anal.* 24 (1990), 53-65
- [41] Sorensen D. C. Implicit application of polynomial filters in a k -step Arnoldi method. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 13 (1992), 357-385
- [42] 戴华. 求解大型非对称特征问题的块 Arnoldi 方法. *南京航空航天大学学报*, 19 (1987), 100-108
- [43] Sadkane M. Block-Arnoldi and Davidson methods for unsymmetric large eigenvalue problems. *Numer. Math.* 64 (1993), 195-211
- [44] Sadkane M. A block Arnoldi-Chebyshev method for computing the leading eigenpairs of large sparse unsymmetric matrices. *Numer. Math.* 64 (1993), 181-193
- [45] Davidson E. R. The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real symmetric matrices. *J. Comp. Phys.* 17 (1975), 87-94
- [46] Morgan R. B. and Scott D. S. Generalization of Davidson's method for computing eigenvalues of sparse symmetric matrices. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 7(1986), 817-825
- [47] Morgan R. B. and Scott D. S. Preconditioning the Lanczos algorithm for sparse symmetric eigenvalue problems. *SIAM J. Sci. Computing*, 14 (1993), 585-593
- [48] Dai Hua and Lancaster P. Preconditioning block Lanczos algorithm for solving large symmetric eigenvalue problems. *J. Comp. Math.* to appear

线性方程组数值解法的若干进展

南京航空航天大学 戴 华

摘要 线性方程组数值解法的理论研究、算法设计和软件研制是大规模科学与工程计算的基础和重要组成部分,其研究工作极为活跃,并取得了许多重大进展。本文概述这些进展的一部分,评述的内容包括 Gauss 消去法和 Krylov 子空间方法,提出一些有待进一步研究的问题。

1 引言

线性方程组特别是大型线性方程组的数值解法是一个非常活跃的研究领域。究其原因首先是科学和技术发展中的许多问题最终归结为求解线性方程组,实际应用促进了线性方程组数值解法中新理论、新技术和新算法的发展;其次是我们对求解线性方程组一些算法的机理尚未完全理解,需要进一步探讨它们的特性;再次是新的计算机体系结构特别是并行计算机迫使我们修改老的算法、设计新的算法。

线性方程组的数值解法分为直接法和迭代法两大类。直接法以 Gauss 消去法为代表。迭代法包括经典迭代法如 Jacobi 迭代法、Gauss-Seidel 迭代法、SOR 迭代法等和 Krylov 子空间方法。本文概述 gauss 消去法和 Krylov 子空间方法的若干进展,提出一些有待进一步研究的问题。

2 Gauss 消去法

Gauss 消去法特别是部分或全主元 Gauss 消去法是求解中、小型线性方程组

$$Ax = b, A \in \mathbb{R}^{n \times n}, B \in \mathbb{R}^n \quad (2.1)$$

最有效的方法之一,而 Gauss 消去法的数值稳定性一直是人们关注的课题。记 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)}) (k=1, \dots, n-1)$ 表示在 Gauss 消去法执行过程中所产生的矩阵, Gauss 消去法的增长因子定义为

$$\rho_n = \frac{\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|}$$

增长因子的大小反映了 Gauss 消去法的稳定性^[1]。人们猜测对全主元 Gauss 消去法有

$$\rho_n \leq n$$

1968 年 Cryer^[2]证明了对 $n=4$ 猜想是对的。但对 $n>4$ 猜测是否成立一直为人们所关注,最近有关全主元和部分主元 Gauss 消去法增长因子的研究取得了突破。Gould^[3]和 Edelman^[4]分别在浮点运算和精确运算的情形构造了反例,说明对全主元 Gauss 消去法 $\rho_n \leq n$ 不成立。但对全主元 Gauss 消去法 ρ_n 比 n 大多少有待研究。

Foster^[5]和 Wright^[6]分别举例说明部分主元 Gauss 消去法的增长因子呈指数型放大。而实际应用中部分主元 Gauss 消去法的稳定性是相当好的。Trefethen^[7]建议用统计方法研究增长因子的特性,并且给出了一个令人信服的结论,解释了部分主元 Gauss 消去法增长

因子几乎总是小的。

3 Krylov 子空间方法

由于计算量和存储量的限制, Gauss 消去法一般不适用于求解大型线性方程组。目前, Krylov 子空间方法是求解大型稀疏线性方程组(2.1)的一类最重要的方法。

设 $x_0 \in \mathcal{R}^n$ 是(2.1)解的初始估计, $r_0 = b - Ax_0$ 是初始残量。称 $K_k(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0\}$ 为由 A 和 r_0 产生的 Krylov 子空间。Krylov 子空间方法求(2.1)的具有如下形式的近似解

$$x_k \in x_0 + K_k(A, r_0) \quad (2.2)$$

并且使残量 $r_k = b - Ax_k$ 满足 Galerkin 条件

$$r_k \perp L_k \quad (2.3)$$

其中 L_k 是 $\mathcal{R}^n$ 中的一个子空间, 或使残量 r_k 的范数极小化, 即

$$\|r_k\| = \min_{x \in x_0 + K_k(A, r_0)} \|b - Ax\| \quad (2.4)$$

用(2.2)和(2.3)定义近似解 x_k 的 Krylov 子空间方法称为正交残量(OR)方法。用 V_k 和 W_k 分别表示子空间 $K_k(A, r_0)$ 和 L_k 的基为列作成的矩阵, OR 方法可行的充要条件是 $W_k^T A V_k$ 非奇异^[8]。用(2.2)和(2.4)定义近似解 x_k 的 Krylov 子空间方法称为极小残量(MR)方法。在(2.3)中选取不同的 L_k 或在(2.4)中选取不同的范数可导出不同的算法。

如果在(2.3)中取 $L_k = AK_k(A, r_0)$, 则 OR 方法产生的近似解与 MR 方法产生的近似解相同^[8]。

1952 年 Hestenes 和 Stiefel^[9]所提出的求解对称正定线性方程组的共轭梯度法(CG)是一个 Krylov 子空间方法。实际上, CG 方法是在向量范数 $\|x\|_A = (Ax, x)^{1/2}$ 下的 MR 方法^[8], 近似解 x_k 满足如下极小化性质

$$\|b - Ax_k\|_{A^{-1}} = \min_{x \in x_0 + K_k(A, r_0)} \|b - Ax\|_{A^{-1}} \quad (2.5)$$

并且^[10]

$$\|x - x_k\|_A \leq 2 \|x - x_0\|_A \left[\frac{\sqrt{K(A)} - 1}{\sqrt{K(A)} + 1} \right]^k \quad (2.6)$$

其中 $K(A)$ 表示 A 的谱条件数。由(2.6)可知, 当 A 的特征值较均匀地分布在一个很长的区间内时, CG 方法的收敛速度可能很慢。如何利用预条件(Precondition)提高 CG 方法的收敛速度是二十多年来研究的一个重要课题^[11]。

3.1 对称不定线性方程组(集)的 CG 型方法

四十多年来, 人们一直设法将 CG 方法推广到对称不定或非对称线性方程组。因为 $\|\cdot\|_{A^{-1}}$ 一般不再是范数, 所以人们通常用如下极小化性质代替(2.5)

$$\|b - Ax_k\|_2 = \min_{x \in x_0 + K_k(A, r_0)} \|b - Ax\|_2 \quad (2.7)$$

1969 年 Luenberger^[12]首先将 CG 方法推广到对称不定线性方程组, 但所给的算法是数值不稳定的。1975 年 Paige 和 Saunders^[13]提出了求解对称不定线性方程组的数值稳定的 SYMMLQ 算法和 MINRES 算法。SYMMLQ 算法是取 $L_k = K_k(A, r_0)$ 的 OR 方法; 而 MINRES 算法是在(2.7)意义下的 MR 方法。SYMMLQ 和 MINRES 利用对称 Lanczos 过程^[14]产生 $K_k(A, r_0)$ 的一组标准正交基。这两个算法以三项递推公式进行计算, 具有计算量小、存