

特殊线性系统的 数值迭代算法

吴世良 李翠霞 张理涛 编著



科学出版社

特殊线性系统的数值 迭代算法

吴世良 李翠霞 张理涛 编著



科学出版社

北京

内 容 简 介

本书介绍求解几类特殊线性系统的基本理论和基本迭代方法. 主要内容为: 绪论、经典迭代法求三类线性系统、矩阵双分裂比较定理及在线性互补问题的应用、HSS 迭代法及其预处理技术、鞍点问题迭代算法及预处理技术、Maxwell 方程的预处理技术、结论等.

本书可作为数学(尤其计算数学、应用数学等)专业师生的教材或科研人员的参考书, 也可作为理工科大学各专业研究生学位课程的教材.

图书在版编目(CIP)数据

特殊线性系统的数值迭代算法/吴世良, 李翠霞, 张理涛编著. —北京: 科学出版社, 2015.6

ISBN 978-7-03-044487-5

I. ①特… II. ①吴… ②李… ③张… III. ①线性系统-迭代法-研究 IV. ①O231.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015) 第 116247 号

责任编辑: 胡海霞 / 责任校对: 钟 洋

责任印制: 徐晓晨 / 封面设计: 迷底书装

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京京华虎彩印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015 年 6 月第 一 版 开本: 720 × 1000 B5

2015 年 6 月第一次印刷 印张: 13 3/8

字数: 270 000

定价: 49.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

随着计算机科学和信息技术日新月异的发展, 科学计算已成为继理论研究及科学实验后的第三大科学研究工具, 目前得到广泛的应用. 许多从事科学研究及工程技术人员现已把科学计算作为研究和解决问题的重要手段.

众所周知, 大型稀疏线性系统的高效数值求解是科学计算中研究的焦点之一, 这主要是因为科学计算和工程技术等应用领域中许多问题的解决可归结为大型稀疏线性系统的求解. 那么, 该如何快速有效地求解大型稀疏线性系统? 针对这一问题, 众多学者及专家针对不同问题在不同条件下产生的不同线性系统提出许多行之有效的方法, 尤其是 Krylov 子空间方法的诞生, 更是加快线性系统的求解速度. 本书的写作正是为实现这一目的. 本书主要针对一些特殊线性系统的数值迭代算法进行深入的研究, 根据线性系统系数矩阵的不同构造一系列适用的迭代算法和预处理技术.

本书主要利用线性代数和矩阵论的基本知识分析得到相关论题的最新研究成果, 对于每一种数值算法及预处理技术, 作者都尽量利用 MATLAB 数学软件给出数值实验, 通过对已有数值算法和预处理技术相比较来验证理论的正确性、算法的可行性及预处理子的有效性. 本书主要面向数学类专业 (尤其是应用数学专业和计算数学专业) 的本科生和研究生, 也可供大规模科学与工程计算、计算机科学等相关领域的技术人员参阅.

本书结果为作者在硕博期间以及在安阳师范学院工作期间的科研成果, 均是作者最新的研究成果, 大都已公开发表. 在此特别感谢云南大学数学与统计学院李耀堂教授和电子科技大学数学科学学院黄廷祝教授给予的指导和帮助. 本书的撰写及出版得到国家自然科学基金青年基金 (项目编号: 11301009) 的大力资助, 同时也得到国家自然科学基金数学天元专项基金 (项目编号: 11026040)、河南省科技发展计划基金 (项目编号: 122300410316) 和河南省教育厅自然科学基金 (项目编号: 13A110022) 的支持.

由于作者水平有限, 书中难免有不妥之处, 欢迎读者批评指正.

作 者

2014 年 11 月 15 日

主要符号对照表

$\langle n \rangle$	数集 $\{1, 2, \dots, n\}$
$\mathbb{N}$	自然数集
$\mathbb{R}$	实数集
$\mathbb{R}^+$	正实数集
$\emptyset$	空集
$\mathbb{C}^n$	复 n 维列向量空间
$\mathbb{R}^n$	实 n 维列向量空间
$\mathbb{C}^{m \times n}$	$m \times n$ 复矩阵集
$\mathbb{R}^{m \times n}$	$m \times n$ 实矩阵集
I	单位矩阵
A^T	矩阵 A 的转置
A^*	矩阵 A 的共轭转置
$ A $	矩阵 A 各元素取绝对值的矩阵
$\ A\ _2$	矩阵 A 的谱范数
$\ A\ _\infty$	矩阵 A 的无穷大范数
(a, b)	向量 a, b 的 Euclidean 内积
$A \geq 0$	矩阵 A 是非负矩阵
$A > 0$	矩阵 A 是正矩阵
$\rho(A)$	方阵 A 的谱半径, 若 A 为非负矩阵, 即为 Perron 根
$\text{null}(A)$	矩阵 A 的零空间
$\text{diag}(d_1, \dots, d_n)$	以 $d_1, \dots, d_n$ 为对角元的对角矩阵
$\text{tridiag}(a, b, c)$	以 b 为主对角元, $a(c)$ 为下(上)次对角元的三对角矩阵
$\otimes$	Kronecker 积符号
$\mathbf{0}$	零向量

目 录

前言

主要符号对照表

第 1 章 绪论	1
1.1 方法介绍	1
1.1.1 经典定常迭代法	3
1.1.2 非 Hermitian 正定线性系统的迭代法	4
1.1.3 鞍点问题的迭代法	4
1.2 涉及知识和主要内容	7
1.3 结构安排	8
第 2 章 经典迭代法求三类线性系统	10
2.1 L -矩阵线性系统的预处理 AOR 迭代法	11
2.1.1 引言	11
2.1.2 助记符, 概念和性质	12
2.1.3 预处理 AOR 迭代法的收敛性分析和比较理论	13
2.1.4 数值算例	19
2.2 一个双参数预处理子作用于 L -矩阵线性系统	20
2.2.1 引言	20
2.2.2 新预处理 AOR 迭代	21
2.2.3 收敛分析	22
2.2.4 数值例子	29
2.3 H -矩阵线性系统的预处理 Gauss-Seidel 迭代法	31
2.3.1 引言	31
2.3.2 概念和性质	32
2.3.3 收敛性分析	32
2.3.4 数值算例	34
2.4 求解最小二乘问题的预处理 AOR 迭代法	34
2.4.1 引言	34
2.4.2 预处理 AOR 迭代法及收敛分析	36
2.4.3 数值算例	41
2.5 AOR 迭代法的一个新版本: QAOR 迭代法	42

2.5.1	经典 AOR 迭代法	42
2.5.2	QAOR 迭代法及收敛分析	43
2.5.3	收敛定理	44
2.5.4	QAOR 与 AOR 的关系	48
2.5.5	数值例子	49
2.6	本章小结	50
第 3 章	矩阵双分裂比较定理及在线性互补问题的应用	51
3.1	矩阵双分裂比较定理	51
3.1.1	引言	51
3.1.2	收敛性理论	52
3.2	矩阵双分裂在线性互补问题的应用	63
3.2.1	引言	63
3.2.2	预备知识	64
3.2.3	二步搜索模系矩阵分裂迭代法	65
3.2.4	收敛定理	67
3.2.5	数值实验	74
3.3	本章小结	79
第 4 章	HSS 迭代法及其预处理技术	80
4.1	选择 HSS 迭代法及 LHSS 迭代法一个新准则	80
4.1.1	引言	80
4.1.2	HSS 迭代法与 LHSS 迭代法的选择	83
4.1.3	两个例子	84
4.2	非 Hermitian 正定线性系统的改进的 HSS 迭代法	86
4.2.1	引言	86
4.2.2	MHSS 迭代法的收敛分析	87
4.2.3	IMHSS 迭代法	90
4.2.4	数值实验	92
4.3	鞍点问题 HSS 预处理矩阵谱的上下界	95
4.3.1	引言	95
4.3.2	谱的新界	96
4.4	广义鞍点问题 HSS 预处理矩阵的谱分布	102
4.4.1	引言	102
4.4.2	广义鞍点问题的 HSS 方法	103
4.4.3	HSS 预处理矩阵的谱性质	104
4.4.4	数值实验	110

4.5	本章小结	114
第 5 章	鞍点问题迭代算法及预处理技术	115
5.1	求解鞍点问题的一个迭代法	116
5.1.1	引言	116
5.1.2	迭代法	116
5.1.3	数值算例	119
5.2	求解鞍点问题的一个修正 SSOR 迭代法	120
5.2.1	引言	120
5.2.2	修正的 SSOR 迭代法	121
5.2.3	参数 w 的选取	126
5.2.4	数值实验	129
5.3	鞍点问题的 (2,2) 块含参数预处理技术	132
5.3.1	引言	132
5.3.2	谱分析	134
5.3.3	数值实验	150
5.4	鞍点问题的 (1,2) 块含参数预处理技术	154
5.4.1	引言	154
5.4.2	MP^{-1} 谱分析	154
5.4.3	数值实验	162
5.5	本章小结	165
第 6 章	Maxwell 方程的预处理技术	166
6.1	波数为零 Maxwell 方程的块三角预处理技术	166
6.1.1	引言	166
6.1.2	新的块三角预处理子	167
6.1.3	新的单列非零 (1,2) 块的块三角预处理子	172
6.1.4	数值实验	174
6.2	波数非零 Maxwell 方程的块三角预处理技术	179
6.2.1	引言	179
6.2.2	修正块预处理子	180
6.2.3	数值实验	187
6.3	本章小结	192
第 7 章	结论	193
参考文献		195

第1章 绪 论

1.1 方法介绍

世界著名数值分析专家牛津大学教授 Lloyd N. Trefethen 和 David Bau III 指出:“如果除了微积分与微分方程,还有什么数学领域是数学科学基础,那就是数值线性代数。”

数值线性代数领域中的一个十分重要的课题是大型稀疏线性系统的高效求解.这主要是在实践中,如计算流体力学、电磁计算、材料模拟与设计、石油勘探数据处理、地震数据处理、数值天气预报及核爆炸数值模拟等都离不开(偏)微分方程的数值求解,而解决这些问题的主要策略是通过有限差分、有限元、有限体积、区域分解、多重网格、无网格等方法对(偏)微分方程离散将所求解问题转化为大型稀疏线性系统的数值求解.当今,如何快速有效的求解大型稀疏线性系统已成为许多专家及学者研究的焦点.这主要体现在数值计算及其模拟中求解大型稀疏线性系统所花费的时间往往在求解整个问题所需的时间中占有很大的比重,有时甚至高达百分之八十以上.

通常,求解线性系统的方法有两类:基于矩阵分解的直接法和基于递归的迭代法.直接法的工作主要集中在 20 世纪 60~70 年代,主要途径是通过对矩阵进行变换(如 Gauss 消元、LU 分解等),将原线性系统化为三角或三对角等容易求解的形式,然后通过回代或追赶等方法得到线性系统的解.其优点在于不计舍入误差的情况下能得到准确解.不足之处是当矩阵的条件数很大时,由于舍入误差的存在而导致所求出的解与准确解相差甚远;当矩阵阶数较大时,由于存储的需求而迫使直接法相对于其他方法更费时.所以用直接法求解大型稀疏线性系统往往是不可取的.基于此,在实际求解中,通常采用运算量小、内存需求小且能充分利用矩阵稀疏性的迭代法.

当前,迭代法已成为求解大型稀疏线性系统的主流方法.迭代求解大型稀疏线性系统现已成为科学计算中十分重要的课题之一,其迭代策略一般可分为两类.一类是基于矩阵分裂的定常迭代法.定常迭代法的工作主要集中于 20 世纪 50~60 年代,其基本途径是通过矩阵单分裂(若线性系统的系数矩阵 A 分裂为 $A = M - N$ (其中 M 为非奇异矩阵),则称为矩阵 A 的单分裂)而构建迭代格式.根据矩阵分裂的形式不同而形成了许多行之有效的方法,如 Jacobi, Gauss-Seidel (G-S), Successive

Over-Relaxation (SOR), Accelerated Over-Relaxation (AOR) 等以及这些方法的改进和加速形式. 定常迭代法具有结构简单、易于程序实现等优点. 因此, 自 Jacobi 方法诞生以来, 新的定常迭代法层出不穷, 备受工程人员及科研人员的青睐. 目前, 这些方法又有新的发展, 如将其作为预处理子与 Krylov 子空间方法结合起来求解大型稀疏线性系统. 另一类是非定常迭代法. 目前, 非定常迭代法主要存在两大分支: 一是以 Conjugate Gradient (CG) 方法为代表的 Krylov 子空间迭代法; 二是基于矩阵分裂的分裂迭代法, 如非定常 Richardson 迭代法、内外迭代法以及非定常多分裂迭代法等. 目前, 对求解大型稀疏线性系统来说, 比较流行的 Krylov 子空间迭代法有 CG, Minimal Residual method (MINRES), Generalized Minimal Residual method (GMRES) 等.

无论是定常迭代法还是非定常迭代法, 其收敛速度在一定程度上与矩阵的谱分布有着密不可分的关系. 对矩阵分裂的定常迭代法来说, 在迭代矩阵谱半径小于 1 的前提下, 迭代矩阵的谱半径越小其收敛速度越快; 对非定常 Krylov 子空间迭代法来说, 其收敛速度依赖于矩阵的谱分布, 谱分布越集中, 收敛速度越快^[1-4]. 因此, 为了提高迭代法求解线性系统的收敛速度, 目前, 一个切实可行的途径是采用预处理技术, 其主要目的是使预处理后的矩阵的谱更加聚集. 为特定大型稀疏线性系统寻找“量身定做”的预处理子已成为迭代法研究中的重要课题.

预处理技术的主要策略是通过利用预处理子将原线性系统转化为易求解的等价线性系统. 通常, 构建一个好的预处理子已被公认为是艺术与科学的完美结合. 一般地, 构造预处理子有两种途径: 一是纯代数技术, 如不完全分解 (ILU) 预处理子、稀疏近似逆 (AINV) 预处理子等; 二是从特定问题出发, 通过利用较多原问题信息来构建预处理子, 一般情况下, 原问题信息利用的越多, 构建的预处理子越有效. 具体地, 对预处理子的构造可以从以下五个方面考虑:

- (1) 线性系统的背景;
- (2) 矩阵本身的性质, 如是否具有稀疏性、对称性、占优性等;
- (3) 预处理部分的计算量比较小;
- (4) 预处理矩阵特征值分布相对集中;
- (5) 预处理矩阵需满足一定的性质, 如是否具有正定性、是否具有对称性、特征值是否全是实数.

一般地, 一个切实可行有效预处理子的选择可以从以下四个方面把握:

- (1) 预处理子在某一方面是系数矩阵的逆矩阵的一个较好逼近 (事实上, 构造预处理子主要目的是使预处理矩阵为单位阵的近似);
- (2) 构造预处理子需在计算机的内存和 CPU 的工作时间上有保障 (即花费不太大);
- (3) 预处理矩阵的条件数要远小于原系数矩阵的条件数, 其最小奇异值会相应

的增大而最大奇异值会相应的减小;

(4) 新的预处理线性系统要比原线性系统更易求解.

当今, 预处理技术已渗入到所需问题的数值求解中, 是提高相应数值算法收敛速度的一个十分重要的途径, 已成为数值计算领域中的一个很重要的研究方向.

1.1.1 经典定常迭代法

在科学计算中, 许多实际问题的求解最终都要归结为求解大型稀疏线性系统:

$$Ax = b,$$

其中 A 是一个给定的非奇异矩阵, b 是一个给定的向量, x 是一个待求的向量. 由于不同问题在不同条件下产生的线性系统不同, 进而导致其相对应的系数矩阵 A 不同, 如在偏微分方程数值解、控制论、均衡论及加权最小二乘问题等数值求解中, 通过适当的技术处理 (如用有限差分离散偏微分方程或对加权最小二乘问题等价变换), 可以获得系数矩阵为非奇异 L -矩阵 (或 H -矩阵) 的线性系统. 如前所述, 若用直接法求解, 则数值效果并没有达到令人十分满意的程度. 常采用迭代法对其求解, 为了加快迭代法的收敛速度, 通常迭代法需要与预处理子结合起来求解大型稀疏的线性系统.

近年来, 对系数矩阵为 $L(H)$ -矩阵的非奇异线性系统预处理子的构造主要是将系数矩阵 A 分裂为 $A = D - L - U$, 其中 D 是 A 的对角矩阵, L 和 U 分别是矩阵 A 的严格下三角矩阵和严格上三角矩阵. 基于这一分裂, 预处理子的构造通常是 “ $D + S$ ” 型, 其中矩阵 S 的元素常取系数矩阵 A 的某些非零元的相反数, 如取系数矩阵 A 的第一列的相反数 [5, 6]、取系数矩阵 A 的上次对角元的相反数 [7, 8] 等. 这种构造预处理子的基本思想源于 Gauss 消元法, 其目的是通过将系数矩阵 A 的某些对应元素化为 0 来达到减少迭代矩阵谱半径的目的, 进而提高迭代法的收敛速度, 其理论依据是迭代矩阵的谱半径越小, 矩阵分裂迭代法的收敛速度越快 [9]. 此类预处理子常常与经典迭代法 (如 G-S 迭代法、SOR 迭代法及 AOR 迭代法等) 结合到一起来求解大型稀疏的线性系统. 此方法的优点是理论性强、计算代价小; 不足之处是计算的效果相对要差. 在这类预处理子中, 修正预处理方法研究较多, 在一定程度上可看成是 Gauss 消元法的一种扩展. 目前, 国内外很多学者对此进行了相关的研究 [10, 11], 得出了很多理论结果, 促进了新预处理子研发的进程.

另一方面, 若将系数矩阵 A 分裂为 $A = P - R - S$ (其中 P 为非奇异矩阵), 则称为矩阵 A 的双分裂 [12], 矩阵双分裂所确定的迭代法称为双分裂迭代法 [12]. 如 Jacobi 双 SOR 方法、G-S 双 SOR 方法、EWA 双 SOR 方法等都属于双分裂迭代法. 这些方法虽是传统单分裂迭代法的简单推广, 但现已有效地求解某些实际问题, 如核反应堆物理学中的离散多维椭圆型方程 [13].

1.1.2 非 Hermitian 正定线性系统的迭代法

大型稀疏非 Hermitian 正定线性系统是一类十分重要的线性系统, 常出现在流体力学、电磁计算等领域中. 其解的重要性在于能够反映出所涉及问题的某些特性, 如稳定性、流量强度、电 (磁) 场分布等, 故对大型稀疏非 Hermitian 正定线性系统的数值求解研究就显得尤为重要.

2003 年, 针对非 Hermitian 正定线性系统的数值求解, Bai 等^[14]提出了基于系数矩阵的 Hermitian 和反-Hermitian 分裂 (HSS) 的 HSS 定常迭代法, 给出了其迭代参数的最优因子, 并指出了在使用最优因子的情况下, HSS 迭代法与 CG 算法相当, 其思想主要是源于对线性系统系数矩阵的 HSS 分裂并结合经典的交替方向隐式迭代技术 (ADI)^[9]. 在文献 [15] 中, Bai, Golub 和 Ng 提出了非精确 HSS 迭代法并对其性质给出了理论性分析, 并给出了收敛条件. 为了改进 HSS 迭代法的收敛速度, Bai, Golub 和 Pan 在文献 [16] 中提出了预处理 HSS 迭代法 (PHSS), 并在文献 [17] 中给出了系数矩阵为非 Hermitian 半正定时 PHSS 迭代法的收敛条件.

由于 HSS 迭代法具有结构简单、易于程序实现且有理论上的最优参数值等优点, 所以自 HSS 迭代法诞生以来就立即受到了许多专家及学者的重视并由此产生了许多新的算法, 如文献 [18], [19] 对 HSS 迭代法进行了不同的推广而提出了正定和反-Hermitian 分裂 (PSS) 迭代法及正规和反-Hermitian 分裂 (NSS) 迭代法. 对 HSS 迭代法来说, 其迭代过程主要涉及两个子线性系统的求解: 一个是 Hermitian 正定子线性系统; 另一个是反-Hermitian 子线性系统. 至于前者, 由于其系数矩阵是 Hermitian 正定的, 所以对其求解可以利用 CG 方法; 至于后者, 由于其系数矩阵是反-Hermitian 的, 所以对其求解并不是一件很容易的事^[20]. 为了克服在 HSS 迭代法中求解反-Hermitian 子系统所带来的困难, 在 2009 年, Benzi^[20]提出了 GHSS 迭代法并给出了收敛条件.

目前, 对 HSS 迭代法的研究主要沿着两个方向: 一是对 HSS 迭代法进行改进或修正而形成的迭代法, 如 LHSS 迭代法^[21]、PHSS 迭代法^[16, 22]、TSS 迭代法^[18]等; 二是将 HSS 迭代法应用到求解其他实际问题当中, 如复线性系统^[23]、鞍点问题^[24]、Sylvester 方程^[25-27]等.

1.1.3 鞍点问题的迭代法

在电磁计算、计算流体动力学、限制和加权最小二乘问题、带有限制条件的二次优化、线性弹力学、椭圆型偏微分方程等许多应用领域中, 常常要求解具有 2×2 块结构的线性系统:

$$\mathcal{A}x = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix} = b,$$

其中 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $C \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (可能 $m \ll n$). 通常, 若矩阵 A 是对称正定的且 $C=0$, 则称为经典的鞍点问题, 否则称为广义的鞍点问题. 对鞍点问题来说, 其系数矩阵 A 常具备三个特点: ① 对称性; ② 特征值有负有正, 具有强不定性; ③ 对角元不占优, 不具有对角占优性. 基于特点②和③, 鞍点问题直接用 Krylov 子空间方法 (如 MINRES, GMRES, BiCGStab 等) 求解, 其迭代速度并不是很理想, 有时甚至不收敛. 由于鞍点问题应用非常广泛, 那么如何快速有效地求解鞍点问题一直是斯坦福大学 Golub、艾默里大学 Benzi、牛津大学 Wathen 等众多学者研究的热点.

经过近几十年不懈的努力, 许多学者对鞍点问题的求解提出了许多行之有效的方法. 下面将简单介绍三类迭代法及预处理 Krylov 子空间方法求解鞍点问题.

1. 三类迭代法求解鞍点问题

(1) Uzawa-类方法. 在 1958 年, Arrow, Hurwicz 和 Uzawa^[28] 首次基于矩阵分裂而提出了经典的 Uzawa 方法. 该方法起初是为了求解经济学中的二次优化问题. 由于该方法具有结构简洁、易于程序实现等优点而吸引了许多学者及专家的眼球. 遗憾的是该方法每一步迭代都需要精确的计算一个逆矩阵, 这对求解大型稀疏线性系统来说几乎是不可行的. 为了克服这个不利因素且又能提高该方法的收敛速度, 文献 [29]~[31] 提出了非精确的 Uzawa 方法并给出了其收敛条件, 从而避免了求逆矩阵所带来的困难. 在文献 [32], [33] 中, Cao 分别研究了用非线性的 Uzawa 方法求解对称及非对称鞍点问题并相应地给出了收敛条件. 目前, 国内外很多学者对 Uzawa-类方法进行了相关的研究 [30, 34], 得出了丰厚的理论成果, 促进了 Uzawa-类方法的研究进程.

(2) SOR-类方法. 在迭代法的历史长河中, Young 于 20 世纪 70 年代提出了一类经典的具有优雅简洁格式的 SOR 迭代法 [35]. 然而, 面对特殊结构的经典鞍点问题, SOR 迭代法并不适合, 这主要因为鞍点问题的 2×2 块或是零矩阵或是半正定矩阵. 为了克服经典 SOR 迭代法求解鞍点问题的缺陷, 近年来, 一些学者开始讨论用广义化的 SOR 迭代法求解鞍点问题, 并取得了新的进展. Li 等在 1998 年提出了一类广义 SOR 迭代法 [36, 37], 此类方法保持了 SOR 迭代法格式简单、存储量小等优点. Golub, Wu 和 Yuan 在 2001 年又提出了 SOR-like 迭代法 [38], 其本质与广义 SOR 方法相同, 可以看成是广义 SOR 迭代法的另一个版本. 为了改善 SOR-like 迭代法的收敛速度, Bai, Parlett 和 Wang 在 2005 年提出了广义的 SOR-like 迭代法 [39] 并获得了最优参数值且推广了文献 [38] 的理论结果. 有关 SOR-类方法的研究文献可参阅文献 [40], [41].

(3) HSS-类方法. 在 2004 年, Benzi 和 Golub^[24] 首次将 HSS 迭代法应用到求解鞍点问题, 给出了求解鞍点问题 HSS 迭代法的收敛条件并提出了含参数的 HSS

预处理子. 大量的数值实验表明当参数在 $0.01 \sim 0.5$ 取值时, 该类预处理子相当有效. 文献 [42], [43] 详细地讨论了鞍点问题 HSS 预处理矩阵的谱性质. 目前, 此类方法刚起步, 发展空间较大.

2. 预处理 Krylov 子空间方法求解鞍点问题

由于鞍点问题系数矩阵常常具备强不定性、非对角占优性等特点, 所以该线性系统通常是病态的, 以至于直接使用 Krylov 子空间方法 (如 MINRES, GMRES 等) 求解鞍点问题, 其迭代速度并不是很理想, 有时甚至不收敛. 为了改善 Krylov 子空间迭代法求解鞍点问题的收敛速度, 通常需要采用预处理技术将其转化为具有较优良性质的等价线性系统. 对鞍点问题来说, 选择预处理子的一个切实可行的途径是从实际问题出发, 利用系数矩阵的性质构造预处理子. 此类方法的特点是特定的预处理子大都只能适用于特定的问题, 不具备普遍性. 但是, 正因为存在这样的特点, 鞍点问题预处理技术的研究依然是许多学者研究的热点问题. 目前, 对鞍点问题预处理子的选择, 国内外很多学者做了大量的工作, 给出了许多预处理子, 其中比较流行的有如下三类.

(1) 块对角预处理子. 若 A 是对称正定矩阵且 C 为零矩阵, 则最基本的块对角预处理子为

$$\begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & BA^{-1}B^T \end{bmatrix}.$$

在文献 [44] 中, Murphy, Golub 和 Wathen 从最小特征多项式的角度分析了此类块对角预处理子的谱性质, 指出了此类预处理矩阵仅有三个不同特征值且对任意具有最优性质或 Galerkin 性质的 Krylov 子空间方法在三步内就能达到准确解. 由于该预处理子含有 Schur 余, 所以在预处理过程中需要精确地计算一个逆矩阵. 这在实际求解过程中几乎是不可行的. 因此, 各种各样的近似块对角预处理子就应运而生, 如文献 [45] 考虑了用尺度化的块对角预处理子代替精确块对角预处理子, 这样既能避免求逆矩阵所带来的困难又能提高迭代法的收敛速度. 文献 [4], [46] 通过对 (1,1) 块一分为二的方式把块对角预处理子推广到应用范围更广的广义鞍点问题, 利用矩阵扰动理论分析了预处理矩阵的谱性质. 对块对角预处理子作用于鞍点问题的研究, 也可参阅文献 [47]~[50].

(2) 块三角预处理子. 在 1988 年, Bramble 等 [51] 对广义鞍点问题的求解首先提出了如下块三角预处理子:

$$\begin{bmatrix} A & B^T \\ 0 & -(C + BA^{-1}B^T) \end{bmatrix},$$

并指出了预处理矩阵特征值全为 1 且最小特征多项式次数为 2. 在不考虑误差的情况下, 任意具有最优性质或 Galerkin 性质的 Krylov 子空间方法在两步内就能达到

准确解. 在此基础上, Ipsen 在文献 [52] 中将块三角预处理子推广到更为一般的广义鞍点问题, 同样得到上面结果. 与块对角预处理子一样, 块三角预处理子依然含有 Schur 余, 因此, 在实际计算中用近似块三角预处理子代替原块三角预处理子是一种必然的选择. 然而, 在理论上分析近似块三角预处理 Krylov 子空间方法的收敛速度并不是一件很容易的事, 而为了估计其收敛速度, 一些专家及学者通常通过间接分析预处理矩阵的谱分布来侧面反映出其收敛速度的快慢 [53]. 对由 Navier-Stokes 方程离散形成的鞍点问题来说, 合适的块三角预处理子可确保预处理 Krylov 子空间方法的收敛速度与网格的粗细无关 [54, 55]. 对块三角预处理子作用于鞍点问题的研究, 可参阅文献 [56]~[59].

(3) 约束预处理子. 约束预处理子的结构与原鞍点问题系数矩阵的结构相一致, 只不过是 (1,1) 块的 A 被近似取代 (此处用矩阵 M 代替矩阵 A), 具体形式如下:

$$\begin{bmatrix} M & B^T \\ B & -C \end{bmatrix}.$$

原则上, 要求此类预处理子的逆比较容易. 目前, 此类预处理子已被广泛地应用于椭圆型偏微分方程及约束二次优化问题 [60, 61]. Keller 等在文献 [62] 中分析了 $C = 0$ 时预处理矩阵的谱分布及其相对应的特征向量, 刻画了 GMRES 迭代法的收敛行为. 随后, 文献 [62] 的大部分结果被 Cao [63] 推广到非对称的广义鞍点问题. Bergamaschi 在文献 [64] 中讨论了 (1,1) 块和 (2,2) 块均被近似取代的一类更为广义的约束预处理子, 并详细讨论了约束预处理的谱分布, 改进了文献 [65] 中关于预处理矩阵谱分布的刻画. 有关约束预处理子的相关研究可参阅文献 [66]~[69].

当然, 对鞍点问题的求解还有很多种方法, 如直接法 [70, 71]、零空间方法 [72~74]、投影法 [75, 76] 等. 在此不再一一介绍.

1.2 涉及知识和主要内容

本书主要研究矩阵分裂迭代法的收敛和比较理论及其相伴随的预处理技术以及在鞍点问题和 Maxwell 方程中的应用.

主要基础理论: 线性代数的基本知识; 特殊矩阵理论; 特征值理论; 矩阵分裂理论; Krylov 子空间迭代法理论; 有限元理论; MATLAB 程序设计等.

主要内容如下:

(1) 给出 L -矩阵线性系统几类有效预处理子来加速 AOR 迭代法的收敛速度, 并分析其收敛性条件, 而后将该方法应用于求解 H -矩阵线性系统及由最小二乘问题形成的 (2,2) 块线性系统, 并给出 AOR 迭代法的一个新版本及新旧版本之间的联系.

(2) 给出矩阵双分裂的一些新的收敛性和比较定理, 确立单双分裂之间的比较关系, 并通过利用矩阵双分裂的思想, 构建了一类二步搜索模系矩阵分裂迭代法来求解经典的线性互补问题.

(3) 给出择优 HSS 迭代法或 LHSS 迭代法一个新的判据, 并对非 Hermitian 正定线性系统的求解, 提出了一类修正 HSS 迭代法 (MHSS) 及其非精确版本.

(4) 将 HSS 预处理子作用于经典鞍点问题, 给出预处理矩阵特征值分布的新区域, 并将其延伸到非零 (2,2) 块的广义鞍点问题.

(5) 提出修正 SSOR 迭代法 (MSSOR) 求解鞍点问题, 给出其收敛性条件并获得了在适当条件下迭代参数的最优因子.

(6) 分析广义鞍点问题两类含参数块三角预处理子的谱性质, 获得预处理矩阵实复特征值的新分布区域.

(7) 对波数为零的 Maxwell 方程, 通过对含参数预处理子的谱分析, 给出最优块对角及最优块三角预处理子, 并提出新的单列非零 (1,2) 块的块三角预处理子.

(8) 对波数非零的 Maxwell 方程提出两类修正的免增广免 Schur 余预处理子, 通过对预处理矩阵谱的分析, 给出两类最优免增广免 Schur 余预处理子.

1.3 结构安排

本书共分 7 章.

第 1 章主要概述本书的研究问题、研究背景、研究现状、研究内容及结构安排.

第 2 章研究基于矩阵分裂的预处理经典迭代法, 并给出相应算法的收敛性条件及比较定理. 一方面, 给出某些预处理经典迭代法求解 L , H -线性系统及 (2,2) 块线性系统的收敛定理和比较定理; 另一方面, 给出 AOR 迭代法的一个新版本以及确立新旧版本之间的联系.

第 3 章主要阐述矩阵双分裂的收敛和比较定理. 首先, 基于两个不同非奇异矩阵的双分裂, 给出二者之间的收敛性和比较定理, 确立单双分裂之间的比较关系. 其次, 给出单个矩阵非负双分裂及 M -双分裂的一些收敛性和比较定理, 并通过构建一个新矩阵来获取双分裂迭代法的迭代矩阵, 然后再利用单分裂的一些比较定理诱导出双分裂的一些比较定理. 最后, 通过利用矩阵双分裂的思想, 对经典线性互补问题的求解, 构建了一类二步搜索模系矩阵分裂迭代法.

第 4 章主要研究 HSS 迭代法及其预处理技术. 关于 HSS 迭代法或 LHSS 迭代法的选择给出一个新的优先择取的判据; 对非 Hermitian 正定线性系统, 提出一类修正 HSS 迭代法 (MHSS) 及其非精确版本, 并给出相应方法的收敛性定理; 将 HSS 预处理子应用于经典鞍点问题, 探讨 HSS 预处理矩阵的谱分布并将其推广到非零 (2,2) 块的广义鞍点问题.

第 5 章主要研究迭代算法及预处理技术求解鞍点问题, 主要包括给出求解鞍点问题的一个迭代方法并讨论其收敛性条件; 提出修正 MSSOR 迭代法求解鞍点问题, 给出其收敛性条件并探讨迭代参数最优因子的选取; 分析广义鞍点问题两类含参数块三角预处理子的谱性质, 获得预处理矩阵实复特征值的新分布区域.

第 6 章利用预处理技术求解 Maxwell 方程. 对波数为零的混合型时谐 Maxwell 方程, 通过对预处理矩阵的谱分析, 给出最优块对角和最优块三角预处理子, 并提供一个新的单列非零 $(1,2)$ 块的块三角预处理子; 对波数非零的混合型时谐 Maxwell 方程提出两类含参数的免增广免 Schur 余预处理子, 讨论预处理矩阵的谱分布并给出参数最优值.

第 7 章给出本书总结并对有待研究的内容进行展望.