对称正定矩阵的多级迭代法

鲁雪晶[1] 刘仲云[1] 张育林[2]
(1. 长沙理工大学数学与计算科学学院，长沙,410114)
(2. Minho大学数学系,葡萄牙,4710-057)

摘 要 本文主要研究解对称正定矩阵的多级迭代法,并对其收敛性进行证明,最后用数值实验验证此方法的有效性.多级迭代法特别适用于并行计算,并且可以被理解为古典迭代法的扩展,或共轭梯度法的预处理子.

关键词 线性方程组 对称正定阵 多级分裂 迭代法 收敛性

Multistage Iterative Methods for Symmetric Positive Definite Matrices

Lu Xuejing[1] Liu Zhongyun[1] Zhang Yulin[2]
(1. School of Mathematics and Computing Science, Changsha University of Science & Technology, Changsha 410114, China)
(2. Centro de Matemática, Universidade do Minho, 4710-057 Braga, Portugal)

Abstract In this paper a multistage iterative method for solving the symmetric positive definite linear systems is established and the convergence of the method is proved. A numerical example is given to illustrate the effectiveness of our method. The method is especially suitable for parallel computation, and can be viewed as a extension of the classical iterative method or as a preconditioner for the conjugate gradient method.

Key words Linear Systems Symmetric Positive Definite Matrix Multistage Splitting Iterative Method Convergence

1 引言

考虑大型线性方程组

$$Ax = b \tag{1}$$

的迭代解法,其中系数矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 为实对称正定矩阵.

Supported by the National Natural Science Foundation of China under Grant No. 10771022, by FEDER Funds through "Programa Operacional Factores de Competitividade - COMPETE" and by Portuguese Funds through "Fundação para a Ciência e a Tecnologia", within the Project PEst - C/MAT/UI0013/2011 and PTDC/MAT/112273/2009, Portugal
收稿日期:2013年2月26日

令 A 的一个分裂为 $A = M - N$. 那么用古典迭代法来求解线性方程组(1)的形式为

$$Mx_{k+1} = Nx_k + b, \quad k = 0,1,\cdots. \tag{2}$$

易知,对于任意给定的初始值 x_0,当且仅当 $\rho(M^{-1}N) < 1$ 时,由(2)所产生的迭代序列 x_k 是收敛的,这里 $M^{-1}N$ 称为迭代矩阵.

在另一方面,二级迭代法[2,3,4,5,7],也称为内外迭代法,包括求解线性方程组(2)中的迭代,即继续作分裂 $M = F - G$ 且对于 第 k 次外迭代,进行 p_k 次内迭代. 迭代算法如下,

算法 1(两级迭代法)

function twostage(A,b,x_0)

  for $k = 0,1,\cdots,$

    $y_0 = x_k,$

      for $j = 1,\cdots,p_k,$

        $Fy_j = Gy_{j-1} + (Nx_k + b),$

      $x_{k+1} = y_{p_k}.$

其中 k 是外迭代数,而 p_k 是内迭代数. 若对每一步外迭代,其内迭代次数 p_k 都是固定不变的,我们称之为定常二级迭代法;若内迭代次数 p_k 随着外迭代指标 k 的不同而不同,则我们称之为非定常二级迭代法.

在本文中,我们首先利用“分合方法”的思想对对称正定矩阵进行多级分裂,并以此为基础构建多级迭代算法求解线性方程组(1),其中系数矩阵的最里层的内迭代是块对角,所以求它的逆是比较容易的. 最后,我们证明了这种迭代方法是收敛的.

2 多级迭代法

在这一节中,我们将讨论对称正定矩阵 A 的多级迭代法的分裂构造.

对 A 进行分块 $A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$,其中,若 $n = 2m$, $A_{ii} \in R^{m\times m}, i = 1,2$;若 $n = 2m+1$, $A_{11} \in R^{m\times m}$, $A_{22} \in R^{(m+1)\times(m+1)}$.

设 $F^{(1)} = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$, $G^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 & -A_{12} \\ -A_{21} & 0 \end{bmatrix}$, 我们可以得到矩阵 A 的第一级分裂,即 A 的 2×2 的块 Jacobi 分裂.

同样的对 $F^{(1)}$ 进行分块

$$F^{(1)} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(2)} & A_{12}^{(2)} & & \\ A_{21}^{(2)} & A_{22}^{(2)} & & \\ & & A_{3,3}^{(2)} & A_{3,4}^{(2)} \\ & & A_{4,3}^{(2)} & A_{4,4}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad F^{(2)} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(2)} & & & \\ & A_{22}^{(2)} & & \\ & & A_{33}^{(2)} & \\ & & & A_{44}^{(2)} \end{bmatrix},$$

就得到 A 的二级分裂 $A = F^{(2)} - G^{(2)} - G^{(1)}$.

以此类推,对于 $t = 1,2,3,\cdots$, 我们可以对矩阵进行下面的分块,

$$F^{(t-1)} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(t-1)} & & \\ & \ddots & \\ & & A_{2^{t-1},2^{t-1}}^{(t-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(t)} & A_{12}^{(t)} & & & \\ A_{21}^{(t)} & A_{22}^{(t)} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & A_{2^t-1,2^t-1}^{(t)} & A_{2^t-1,2^t}^{(t)} \\ & & & A_{2^t,2^t-1}^{(t)} & A_{2^t,2^t}^{(t)} \end{bmatrix},$$

$$F^{(t)} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(t)} & & & & \\ & A_{22}^{(t)} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & A_{2^t-1,2^t-1}^{(t)} & \\ & & & & A_{2^t,2^t}^{(t)} \end{bmatrix}, \quad G^{(t)} = F^{(t-1)} - F^{(t)}, \tag{3}$$

最后就得到了 A 的 t 级分裂 $A = F^{(t)} - \sum_{k=1}^{t} G^{(k)}$.

根据上面的多级分裂,现可以得到求解线性方程组(1)的多级迭代算法,为简化算法,设 $n = 2^q$.

算法 2(多级迭代法)

function multistage(A,x,b_0)

  for $k = 0,1,\cdots,$

    for $i = 1,2$

      $y_{0,i} = x_{k,i}$

        $s = 1$

          for $t = s: -1:0$

          $M^{(s)}(n/2^t+1:n/2^{t-1},n/2^t+1:n/2^{t-1}) = A(n/2^t+1:n/2^{t-1},n/2^t+1:n/2^{t-1})$

            $N^{(s)} = M^{(s)} - A$

              for $t = 2s: -1:0$

        $F^{(s)}(n/2^t+1:n/2^{t-1},n/2^t+1:n/2^{t-1}) = A(n/2^t+1:n/2^{t-1},n/2^t+1:n/2^{t-1})$

          $G^{(s)} = F^{(s)} - M^{(s)}$

        if $s = q$

      $y_{j,i} = twos - tage(F_i^{(s-1)},G_i^{(s-1)}y_{j-1,i} + N^{(s-1)}x_{k,i} + b,x_0^{(s-1)})$

    elseforj $= 1,\cdots,p_k^{(s-1)}$

  $y_{j,i} = multistage(F_i^{(s-1)},G_i^{(s-1)}y_{j-1,i} + N^{(s-1)}x_{k,i} + b,x_0^{(s-1)})$

$s = s + 1$

$x_{k+1,i} = y_{p_k^{(s-1)},i}$.

3 收敛性证明

我们先回顾一下后面将要使用的定义和定理.

定义1 分裂 $A = M - N$ 称为:

· 对称分裂,若 M 是对称且非奇异的;

· P - 正则分裂,若 $M^T + N$ 是正定的;

· 收敛分裂,若 $\rho(M^{-1}N) < 1$.

定理1[9] 矩阵 $A \in R^{n\times n}$,且 A 是对称阵,若分裂 $A = M - N$ 是一 P - 正则分裂,A 是对称正定的当且仅当 $\rho(M^{-1}N) < 1$.

定理2[6] 矩阵 $A \in R^{n\times n}$,且 A 是正定阵,若分裂 $A = M - N$ 是一个 P - 正则分裂,则 M 正定.

定理3[8,3] 矩阵 $A \in R^{n\times n}$,且 A 是对称正定阵,若分裂 $A = M - N$ 和 $M = F - G$ 为对称收敛分裂,则对于任意的迭代初始向量 x_0 和任意非负偶数 p^k,算法1是收敛的.

基于以上结论,得到以下定理.

定理4 矩阵 $A \in R^{n\times n}$,且 A 是对称正定阵,则按照(3)方式分裂得到的 $F^{(t-1)} = F^{(t)} - G^{(t)}$,都是收敛的,且 $F^{(t)}$,$t = 0,1,2,\cdots$,都是正定的.

证明 因为每一个分裂都是类似的,我们只证明第一个分裂,其他分裂的证明用同样的方法就可以了.

令 $A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$, 则其分裂为 $A = M - N$, 其中 $M = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$, $N = \begin{bmatrix} 0 & -A_{12} \\ -A_{21} & 0 \end{bmatrix}$.

令 $Q = \begin{bmatrix} I & 0 \\ A_{21}A_{11}^{-1} & I \end{bmatrix}$, $S = A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$. 记 $A_{12} = A_{21}^T$, 则有 $A = Q\begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & S \end{bmatrix}Q^T$, 那么 $A_{11} \oplus S$ 和 A 是合同的. 因为 A 是对称正定的, 所以 $A_{11} \oplus S$ 也是对称正定的.

同时, 令 $P = \begin{bmatrix} I & 0 \\ -A_{21}A_{11}^{-1} & I \end{bmatrix}$, 则 $P\begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & S \end{bmatrix}P^T = M + N$, 那么 $A_{11} \oplus S$ 和 $M + N$ 是合同的, 所以 $M + N$ 也是对称正定的.

根据定义,分裂 $A = M - N$ 是 P - 正则分裂. 根据定理1, $\rho(M^{-1}N) < 1$,那么关于 A 的分裂 $A = M - N$ 是收敛的. 依照定理2, M 正定的. 也就是说 A_{11} 和 A_{22} 都是正定的,那么我们可以用同样的方法来证明分裂 $F^{(t-1)} = F^{(t)} - G^{(t)}$ 是收敛的且 $F^{(t)}$ 是正定的.

定理5 矩阵 $A \in R^{n\times n}$,且 A 是对称正定阵,则对于任意的迭代初始向量 x_0 和任意内迭代次数是非负偶数序列 $p^k \geq ;k = 1,2,\cdots$, 多级迭代算法2是收敛的.

证明 设矩阵分裂了 s 次,则 分裂 $F^{(s)} = F^{(s+1)} - G^{(s+1)}$ (内分裂)和分裂 $F^{(s-1)} = F^{(s)} - G^{(s)}$ (外分裂)构成了一个二级迭代,根据定理4, 我们知道 当内迭代数是固定的时候,这两个分裂都是 P - 正则分裂. 因此,当内迭代数是偶数时最里面的二级迭代是收敛的. 接着与上一

级分裂 $F^{(s-2)}$（同样是 P －正则分裂）结合可以得到一个新的二级迭代，同样当内迭代数是偶数时这个新的二级迭代也是收敛的．不断重复这一过程，那么最后得到一个收敛的多级迭代法．

4 数值实验

在这一节内，我们将通过一个数值例子来展示多级迭代算法 2 的几个特性，并将之与古典 Jacobi 迭代法和 Ssor 迭代法相比较．这个数值实验结果是使用 Matlab 7.2.0.232(R2006a) 在 Pentium M1.6GHz 的计算机上运算出来的．

数值例子是椭圆方程离散后得到的线性方程组，其生成的矩阵是对称正定的，我们采用阶数是 $n = 1024$，其中 b 为元素全为 1 的向量，初始值 x_0 是零向量，终止条件是 $\|x_{k+1} - x_k\|_2 \leq 10^{-6}$．根据前面的分裂构造方法，对于同一层的内迭代，其矩阵的分裂构造和迭代 矩阵均相同，因此，我们可以知道收敛速度只与迭代矩阵相关，因此我们只考虑定常的多级迭代．

表 1 迭代数值实验结果

方法	分裂次数	内迭代数	迭代次数	时间(s)	误差($\times 10^{-7}$)
2 − stage	2	4	98	257.797	4.574
parallel	2	4	98	164.156	4.574
3 − stage	3	4	98	197.737	4.663
	3	6	97	293.531	5.469
	3	8	97	393.812	5.414
parallel	3	4	98	74.422	4.663
	3	6	97	105.719	5.469
	3	8	97	123.373	5.414
4 − stage	4	4	97	241.64	5.479
	4	6	98	362.219	5.409
	4	8	97	482.829	5.380
parallel	4	4	97	78.188	5.479
	4	6	98	114.625	5.409
	4	8	97	143.235	5.380
5 − stage	5	4	97	247.125	5.476
	5	6	98	366.24	5.407
	5	8	97	487.797	5.379
parallel	5	4	97	84.813	5.476
	5	6	98	118.86	5.407
	5	8	97	145.907	5.379
Jacobi			1947	347.781	3.929
parallel			−	−	−
SSOR			51	210.641	2.753
parallel			51	170.51	2.753

从最后的实验结果来看,我们发现分裂次数和内迭代次数对于全局运算速度有很大的影响,但是对于最终误差基本没影响. 我们知道迭代矩阵的谱半径会随着内迭代次数的增加而减少[3].谱半径越小,那么收敛速度越快. 在一定程度上,内迭代次数的增加可减少运行时间,但太多的内部循环,将会增加运算的时间. 例如,在分裂次数是3,内迭代次数是4时运算结果要优于其他迭代. 全局收敛速度主要依赖于外迭代次数. 因此,无论是分裂次数还是内迭代次数都应控制在一个较小的正整数[1,3]这个结论也曾在二级迭代法有过论述.

众所周知,对于对称正定方程组,Jacobi(block Jacobi)有可能不收敛,例如,在我们的数值试验中并行 Jacobi 迭代是不收敛的. 但是,多级迭代算法是收敛的. 多级迭代算法的另一个优越性是特别适用于并行计算. 即使在个人计算机上进行并行计算,也能缩短50%的运算时间.

最后,我们想指出的是,依然存在几个有意义的问题有待今后的研究,例如如何寻找最优内迭代数以及多级分裂的预处理子的讨论。

参考文献

[1] F. Cai, Y. S. Xiong, Z. G. Luo The approximate optimal number of inner iterations of block two iterative mathods, Mathematica Numerica Sinica, 30(1) (2008), pp. 89 -98

[2] Z. H. Cao, On the convergence of nested stationary iterative methods, Linear Algebra Appl., 221 (1995), pp. 159 - 170.

[3] Z. H. Cao, Convergence of nested iterative methods for symmetric P - regular splittings, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 22 (2000), pp. 20 -32.

[4] A. Frommer, D. B. Szyld, H - splittings and two - stage iterative methods, Numer. Math., 63 (1992), pp. 345 -356.

[5] A. Frommer, D. B. Szyld, Asynchronous two - stage iterative methods, Numer. Math., 69 (1994), pp. 141 -153.

[6] R. Nabben, A note on comparison theorems for splittings and multisplittings of Hermitian positive definite matrices, Linear Algebra Appl., 233 (1996), pp. 67 -80.

[7] N. K. Nichols, On the convergence of two - stage iterative process for solving linear equations, SIAM J. Numer. Anal., 10 (1973), pp. 460 -469.

[8] Zhong - Yun Liu, He - Bing Wu, Lu Lin, The two - stage iterative methods for symmetric positive definite matrices, Applied Mathematics and Computation, 114 (2000), pp. 1 - 12.

[9] J. M. Ortega, Numerical Analysis: A Second Course, Academic Press, New York, 1972.