

二次特征值问题的并行 Jacobi-Davidson 方法及其应用*

王顺绪

(南京航空航天大学理学院, 南京 210016;
淮海工学院数理系, 江苏连云港 222005)

戴 华

(南京航空航天大学理学院, 南京 210016)

摘 要

给出了求解二次特征值问题多个特征对的一种并行 Jacobi-Davidson 方法, 该方法在子空间中求解投影矩阵的二次特征值问题, 利用校正方程的解扩充子空间, 并以某型号机翼在结构动力分析中的二次特征值问题为例, 在多台处理机并行系统 IBM-P650 上进行了数值试验, 试验结果表明该算法具有较高的加速比和并行效率.

关键词: 二次特征值问题, Jacobi-Davidson 方法, 并行计算, IBM-P650

MR (2000) 主题分类: 65F15, 65Y05

A PARALLEL JACOBI-DAVIDSON METHOD FOR SOLVING QUADRATIC EIGENVALUE PROBLEM AND ITS APPLICATION

Wang Shunxu

(College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China;
Dept. of Mathematics and Physics, Huahai Institute of Technology, Lianyungang 222005, China)

Dai Hua

(College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract

A parallel Jacobi-Davidson method is presented for computing a few of eigenpairs of quadratic eigenvalue problems. The method directly solves the quadratic eigenvalue problems in a projection subspace, and expands the subspace by the solution of the correction equation. The parallel implementation of the method is discussed, and a quadratic eigenvalue problem arising from structural dynamics analysis of a plane wing is solved by the method on the parallel computer IBM-P650. The numerical experiments show that the parallel Jacobi-Davidson method is very effective.

Keywords: quadratic eigenvalue problem, Jacobi-Davidson method, parallel computing, IBM-P650

2000 Mathematics Subject Classification: 65F15, 65Y05

* 2007 年 9 月 28 日收到.

1. 引言

二次特征值问题 (QEP-Quadratic Eigenvalue Problem) 在工程领域中的应用越来越受到人们的重视. 如果问题的规模很大, 相应矩阵的阶数也就很高, 研究这些问题的并行算法, 并借助于并行计算机求解已成为重要的课题, 所谓 QEP 问题, 就是求数 λ 和非零向量 x 使得

$$(\lambda^2 M + \lambda C + K)x = 0, \quad (1.1)$$

其中 M , K 和 C 是 n 阶方阵, x 称为对应于特征值 λ 的特征向量. 和线性特征值问题不同, 二次特征值问题的特征值个数不超过 $2n$, 如果矩阵 M 非奇异, 二次特征值问题恰有 $2n$ 个特征值, 但其线性无关特征向量的个数不超过 n . 求解二次特征值问题的一般方法是将其线性化为广义特征值问题 (GEP-Generalized Eigenvalue Problem)

$$Au = \lambda Bu, \quad (1.2)$$

其中 $A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}$ 是 $2n$ 阶方阵, $u = \begin{pmatrix} x \\ \lambda x \end{pmatrix}$. 一般情况下, 矩阵 A_{ij} 和 B_{ij} ($i, j = 1, 2$) 可以取为 M , C 和 K 的某种线性组合. 如果 M , C 和 K 对称, 则 $A = -\begin{pmatrix} 0 & K \\ K & C \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} -K & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix}$ 也对称, 而且满足 (1.2). 如果 M , K 对称, C 反对称, 则相应的二次特征值问题称为陀螺特征值问题, 这时若取 $A = \begin{pmatrix} 0 & K \\ -K & -C \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} K & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix}$, 则 A 反对称, B 对称.

QEP 问题转变成 GEP 问题后, 可以借助 GEP 问题的数值方法求解 QEP 问题, 但存储量和计算量明显增加, 并且 QEP 问题中矩阵的很多良好性质比如对称性、正定性和稀疏性等可能不会在 GEP 问题中得到体现, 因此寻找一种直接将 QEP 问题投影到子空间求解的数值方法是非常必要的.

1996 年 Sleijpen 等给出了求解矩阵特征值及其对应特征向量近似值的 Jacobi-Davidson 方法^[1,2], 该方法利用校正方程的解扩充子空间, 使 Ritz 对很快收敛于特征对. 在 Sleijpen 等工作的基础上, Betcke 等研究了非线性特征值问题的 Jacobi-Davidson 类的投影方法^[3]. Meerbergen 研究了二次特征值问题 $Ku + i\omega Cu - \omega^2 Mu = 0$ 的残量迭代法和 Jacobi-Davidson 方法^[4]. Stathopoulos 等在 [5] 中研究了粗粒度并行计算环境下广义特征值问题的并行 Jacobi-Davidson 算法, 为提高并行计算的效率, 该文对 Jacobi-Davidson 方法作了大胆的使用, 为求得多个特征对的近似值, 选取 k 个初始向量进行迭代, 以避免使用收缩技术, 而这种方法不一定能保证每个 Ritz 对都是收敛的. 本文研究了 QEP 问题的并行 Jacobi-Davidson 方法, 在 IBM-P650 并行计算机上以某机翼在比例阻尼条件下的二次特征值问题为例, 进行了数值试验.

为叙述方便起见, GEP 问题的 Jacobi-Davidson 方法和 QEP 问题的 Jacobi-Davidson 方法分别记为 GJD 方法和 QJD 方法.

2. 二次特征值问题的 Jacobi-Davidson 方法

文 [4] 将形如 $Ku + i\omega Cu - \omega^2 Mu = 0$ 的二次特征值问题转变成线性特征值问题, 并将线性化后的特征值问题投影到以矩阵 $V_{2i} = \begin{pmatrix} V_i & 0 \\ 0 & V_i \end{pmatrix}$ 的列为基的子空间中, 其中 V_i 代表以 n 阶方阵的投影子空间的基组成的矩阵. 同样, 我们也可以将一般二次特征值问题 (1.1) 线性化后的 GEP 问题 (1.2) 投影到以矩阵 $V_{2i} = \begin{pmatrix} V_i & 0 \\ 0 & V_i \end{pmatrix}$ 的列为基的子空间上, 从而得到相应于 GEP 问题的重新开始 Jacobi-Davidson 算法.

算法 1.

- 1) 选取 $v_1 \in R^n, V_1 = [v_1]$, 精度 ε , 正整数 m ;
- 2) 对 $i = 1, 2, \dots, m$ 执行以下各步:
 - 2.1) $V_{2i} = \begin{pmatrix} V_i & 0 \\ 0 & V_i \end{pmatrix}$;
 - 2.2) 计算 $W_{Ai} = AV_{2i}, W_{Bi} = BV_{2i}$;
 - 2.3) 计算 $H_{Ai} = V_{2i}^H W_{Ai}, H_{Bi} = V_{2i}^H W_{Bi}$;
 - 2.4) 计算 $H_{Ai} z_i = \theta_i H_{Bi} z_i$ 的目标特征对 (θ_i, z_i) ;
 - 2.5) 计算 Ritz 向量 $u_i = V_{2i} z_i$;
 - 2.6) 计算残量 $r_i = (W_{Ai} - \theta_i W_{Bi}) z_i$;
 - 2.7) 收敛性检查, 若 $\|r_i\|_2 < \varepsilon$ 则停止;
 - 2.8) 若不收敛, 则求解校正方程 $(I - \frac{Bu_i u_i^H}{u_i^H B u_i})(A - \theta_i B)(I - \frac{u_i u_i^H}{u_i^H u_i}) \begin{pmatrix} t_{1i} \\ t_{2i} \end{pmatrix} = -r_i$;
 - 2.9) 若 $\dim(V_i) \leq m - 1$, 则 $V_{i+1} = MGS(V_i, t_{1i})$, 否则转 3);
- 3) $V_1 = [u_m]$, 转 2) 重新开始.

算法 1 将 n 阶的 QEP 问题转变成了 $2n$ 阶的 GEP 问题, 增加了存储量. 现采用将 QEP 问题直接投影到子空间中的 Jacobi-Davidson 方法, 并对这一方法进行改进, 最后将其并行化. 在算法 1 中 MGS 代表修正的 Gram-Schmidt 正交化过程. 由 [2,3] 可知, QJD 方法的校正方程为

$$(I - \frac{(2\theta_i M + C)\tilde{x}_i \tilde{x}_i^H}{\tilde{x}_i^H (2\theta_i M + C)\tilde{x}_i})(\theta_i^2 M + \theta_i C + K)(I - \tilde{x}_i \tilde{x}_i^H) t_i = -\tilde{r}_i, t_i \perp \tilde{x}_i, \quad (2.1)$$

其中 (θ_i, \tilde{x}_i) 是问题 (1.1) 的 Ritz 对, 残量 $\tilde{r}_i = (\theta_i^2 M + \theta_i C + K)\tilde{x}_i$. 校正方程 (2.1) 的系数矩阵是方程 (1.1) 的 Jacobi 矩阵 [3], 其解是非线性方程组 (1.1) 的一步 Newton 迭代法的结果, 由文 [2,3] 结合重启方法, 串行的 QJD 方法如算法 2 所示.

算法 2.

- 1) 选取 $v_1 \in R^n, V_1 = [v_1]$, 精度 ε , 正整数 m ;
- 2) 对 $i = 1, 2, \dots, m$ 执行以下各步:
 - 2.1) 计算 $W_{Ki} = KV_i, W_{Ci} = CV_i, W_{Mi} = MV_i$;
 - 2.2) 计算 $K_i = V_i^H W_{Ki}, C_i = V_i^H W_{Ci}, M_i = V_i^H W_{Mi}$;
 - 2.3) 计算 $(K_i + \theta_i C_i + \theta_i^2 M_i) s_i = 0$ 的目标特征对 (θ_i, s_i) ;
 - 2.4) 计算 Ritz 向量 $\tilde{x}_i = V_i s_i$;
 - 2.5) 计算残量 $\tilde{r}_i = (W_{Ki} + \theta_i W_{Ci} + \theta_i^2 W_{Mi}) s_i$;
 - 2.6) 收敛性检查, 若 $\|\tilde{r}_i\|_2 < \varepsilon$ 则停止;
 - 2.7) 否则, 求解校正方程 $(I - \frac{(2\theta_i M + C)\tilde{x}_i \tilde{x}_i^H}{\tilde{x}_i^H (2\theta_i M + C)\tilde{x}_i})(\theta_i^2 M + \theta_i C + K) t_i = -\tilde{r}_i, t_i \perp \tilde{x}_i$;
 - 2.8) 若 $\dim(V_i) \leq m - 1$, 则 $V_{i+1} = MGS(V_i, t_i)$, 否则转 3);
- 3) $V_1 = [\tilde{x}_m]$, 转 2) 重新开始.

算法 2 中, 每次迭代只需计算 W_{Ki}, W_{Ci} 和 W_{Mi} 的最后一列以及 K_i, C_i 和 M_i 的最后一行和最后一列, 其余元素不变.

QEP 问题的投影过程和相应的线性化后的 GEP 问题的投影过程产生相同的 Ritz 对, 这一关系由定理 1 给出.

定理 1. 假设 QEP 问题 (1.1) 的以矩阵 V_i 的列为基的子空间中的 Ritz 对为 (θ_i, \tilde{x}_i) , $\tilde{u}_i = (\tilde{x}_i, \theta_i \tilde{x}_i)^T$, 则 (θ_i, \tilde{u}_i) 是 (1.2) 在以矩阵 $\begin{pmatrix} V_i & 0 \\ 0 & V_i \end{pmatrix}$ 的列为基的子空间中的 Ritz 对.

证明. 假设 $A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}$, 其中矩阵 $A_{11}, A_{12}, A_{21}, A_{22}, B_{11}, B_{12}, B_{21}, B_{22}$ 都是 $n \times n$ 矩阵, 若 (λ, x) 是 (1.1) 的特征对, 令 $u = (x, \lambda x)^T$, 则 (λ, u) 是 (1.2) 的特征对, 即 $\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ \lambda x \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ \lambda x \end{pmatrix}$, 展开得到

$$\lambda^2 B_{12}x + \lambda(B_{11} - A_{12})x - A_{11}x = 0, \quad (2.2)$$

$$\lambda^2 B_{22}x + \lambda(B_{21} - A_{22})x - A_{21}x = 0, \quad (2.3)$$

(2.2) 和 (2.3) 至少有一个和式 (1.1) 相同, 同时另一式是恒等式, 由此可知若 (θ_i, \tilde{x}_i) 是 (1.1) 的 Ritz 对, 并且 $\tilde{x}_i = V_i \tilde{y}_i$, 则

$$V_i^H [\theta_i^2 B_{12} + \theta_i(B_{11} - A_{12}) - A_{11}] V_i \tilde{y}_i = 0, \quad (2.4)$$

$$V_i^H [\theta_i^2 B_{22} + \theta_i(B_{21} - A_{22}) - A_{21}] V_i \tilde{y}_i = 0, \quad (2.5)$$

(2.4) 和 (2.5) 合在一起即为

$$\begin{pmatrix} V_i & 0 \\ 0 & V_i \end{pmatrix}^H \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_i & 0 \\ 0 & V_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{y}_i \\ \theta_i \tilde{y}_i \end{pmatrix} = \theta_i \begin{pmatrix} V_i & 0 \\ 0 & V_i \end{pmatrix}^H \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_i & 0 \\ 0 & V_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{y}_i \\ \theta_i \tilde{y}_i \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

即 (θ_i, \tilde{u}_i) 是 (1.2) 在以矩阵 $\begin{pmatrix} V_i & 0 \\ 0 & V_i \end{pmatrix}$ 的列为基的子空间中的 Ritz 对, 反之, 若 (2.6) 成立, 则 (2.4)(2.5) 也成立.

同样, 参考 [4] 可知算法 1 和算法 2 校正方程的解扩充的子空间是等价的.

在算法 2 中校正方程的求解是关键, 假设 $T(\theta_i) = \theta_i^2 M + \theta_i C + K$, $p_i = (2\theta_i M + C)\tilde{x}_i, \tilde{r}_i = T(\theta_i)\tilde{x}_i$, 由 $t_i \perp \tilde{x}_i$ 可知, 校正方程 (2.1) 等价于

$$T(\theta_i)t_i - \alpha p_i = -\tilde{r}_i, \quad (2.7)$$

其中 α 的值由 $t_i \perp \tilde{x}_i$ 确定, 即

$$\alpha = \frac{\tilde{x}_i^H T^{-1}(\theta_i)\tilde{r}_i}{\tilde{x}_i^H T^{-1}(\theta_i)p_i}, \quad (2.8)$$

实际计算时, 可以选取 $T(\theta_i)$ 的近似, 从而得到 $T^{-1}(\theta_i)$ 的近似. 假设 D 代表 $T(\theta_i)$ 的对角矩阵, $-L$ 表示 $T(\theta_i)$ 的严格下三角矩阵, $-U$ 表示 $T(\theta_i)$ 的严格上三角矩阵, 则可以选取 D 或 $T(\theta_i)$ 的三对角矩阵、五对角矩阵、不完全 Cholesky 分解、或者选其 SSOR 迭代的分裂矩阵 $M = \frac{\omega}{2-\omega}(\frac{D}{\omega} - L)D^{-1}(\frac{D}{\omega} - U)$, 甚至于可以选择 Gauss-Seidel 迭代的分裂矩阵 $D - L$ 作为 $T(\theta_i)$ 的近似以方便地得到 (2.7) 的解.

由于二次特征值问题不再具有与 Schur 标准型类似的良好形式, 在收缩后的空间上得到的结果往往不能保证是特征值 [6], 因此在并行计算二次特征值问题的多个特征对时, 参考文献 [6] 对算法 2 作了改进, 得到算法 3. 算法 3 用最接近收敛的 Ritz 向量和 Ritz 向量的残量经校正方程处理后的解扩充子空间. 如果当前 Ritz 向量收敛, 就继续求解下一个, 直到得到要求的 Ritz 向量的个数, 否则就用其残量扩充子空间, 如果子空间的维数达到最大且所求特征值还没有全部收敛时重新启动. 算法 3 中, m 是子空间的最大维数, l 是要求的特征对的数量, q 是重新启动时子空间的维数, p 代表工作变量, ε 是给定的精度.

算法 3.

- 1) 选取 $v_1 \in R^n$ 且 $\|v_1\|_2 = 1$, 精度 $\varepsilon > 0$, 正整数 m 和 q , 并置 $i = 1, p_1 = 0$;
- 2) if ($p_1 \leq l$) $V_i = [v_1, \dots, v_i]$

- 2.1) 计算 $W_{K_i} = KV_i, W_{C_i} = CV_i, W_{M_i} = MV_i$;
- 2.2) 计算 $K_i = V_i^H W_{K_i}, C_i = V_i^H W_{C_i}, M_i = V_i^H W_{M_i}$;
- 2.3) 计算 $(K_i + \theta_i C_i + \theta_i^2 M_i)s_i = 0$ 的全部特征对 (θ_j, s_j) , 并对 θ_j 排序;
- 2.4) 对 $k = 1, \dots, l$ 执行以下各步;
 - (a) 计算残量 $\tilde{r}_k = (W_{K_i} + \theta_k W_{C_i} + \theta_k^2 W_{M_i})s_k$;
 - (b) 如果 $\|\tilde{r}_k\|_2 \leq \varepsilon$, 则 Ritz 向量 $\tilde{x}_k = V_i s_k$ 作为矩阵 X 的第 k 列, 并计算下一个, 如果对所有的 Ritz 向量都收敛则计算结束, 否则转 (c);
 - (c) $p_1 = k$;
 - (d) 如果 $i \geq m$;
 - (d1) 对 j 从 p_1 到 q 计算 θ_j 对应的 Ritz 向量 $\tilde{x}_j = V_i s_j$, 并令 \tilde{x}_j 作为矩阵 X 的第 j 列;
 - (d2) $V_q = MGS(X), i = q$;
 - (d3) 转 2);
- 2.5) 若 $i < m$, 则求解校正方程 $(I - \frac{(2\theta_k M + C)\tilde{x}_k \tilde{x}_k^H}{\tilde{x}_k^H (2\theta_k M + C)\tilde{x}_k})(\theta_k^2 M + \theta_k C + K)t_k = -\tilde{r}_k$;
- 2.6) 若 $V_{i+1} = MGS(V_i, t_k)$, 转 2).

3. 二次特征值问题的并行 Jacobi-Davidson 方法

算法 3 的计算过程主要体现在矩阵的乘法运算和内积运算, 因此具有较好的并行性, 主要体现在其中的 2.1), 2.2), 2.4), 2.5) 和 2.6), 由于矩阵 K_i, C_i, M_i 的维数较低, 因此 2.3) 的运算量较小, 从减少通讯量的角度考虑, 每个节点机可分别求解 2.3), 该步不需要通讯.

将 V_i 存放在每个处理器中, 节点机的数量用 $nproc$ 表示, n 表示矩阵的阶数, m_i 是节点机 P_i 中平均分配到的矩阵行数, 即 $m_i = n/nproc$, 如果 n 不能整除 $nproc$, 则依节点机的标号从小到大的次序依次多加一行, 直到将多余的行分配完毕.

3.1. 矩阵乘积的并行计算

由于 $W_{K_i} = KV_i, W_{C_i} = WV_i, W_{M_i} = MV_i$, 因此节点机 P_i 可以独立计算 W_{K_i}, W_{C_i} 和 W_{M_i} 的 m_i 行. 对 $K_i = V_i^H W_{K_i}, C_i = V_i^H W_{C_i}, M_i = V_i^H W_{M_i}$ 的并行计算, 只需将 V_i^H 分块, $V_i^H = (V_{i1}^H, \dots, V_{inproc}^H)$, 各子块的规模同矩阵 K, C 和 M 的行分块, 因此各节点机可以独立计算 V_i^H 的列子块与 W_{K_i}, W_{C_i} 和 W_{M_i} 的对应的行子块的乘积, 节点机 P_i 计算 $K_{ip_i} = V_{ip_i}^H W_{K_i}^{p_i}, C_{ip_i} = V_{ip_i}^H W_{C_i}^{p_i}, M_{ip_i} = V_{ip_i}^H W_{M_i}^{p_i}, K_i = \sum_{k=1}^{nproc} K_{ip_i}, C_i = \sum_{k=1}^{nproc} C_{ip_i}, M_i = \sum_{k=1}^{nproc} M_{ip_i}$.

3.2. Ritz 向量和残量的并行计算

Ritz 向量 $\tilde{x}_i = V_i s_i$ 的并行计算, 假设 $\tilde{x}_i = (x_{i1}^T, x_{i2}^T, \dots, x_{inproc}^T)^T$, 则 $x_{ip_j} = V_{ip_j} s_i (j = 1, \dots, nproc)$, 即节点机 P_j 独立计算向量 x_{ip_j} .

残量 $\tilde{r}_i = (W_{K_i} + \theta_i W_{C_i} + \theta_i^2 W_{M_i})s_i$ 的并行计算, 假设 $\tilde{r}_i = (r_{i1}^T, r_{i2}^T, \dots, r_{inproc}^T)^T$, 则 $r_{ip_j} = (W_{K_i}^{p_j} + \theta_i W_{C_i}^{p_j} + \theta_i^2 W_{M_i}^{p_j})s_i$, 由此可见 r_{ip_j} 及 r_{ip_j} 各列范数的计算是独立的, 经过整体求和, 各节点机可以得到残量范数, 进行收敛性检查, 若满足收敛性条件则停止计算; 否则进行下一步运算.

3.3. 校正方程的并行求解

要求解 t_i , 首先要并行计算 (2.8) 式中的 α , 由 (2.7) 可知 $t_i = T^{-1}(\theta_i)(\alpha p_i - \tilde{r}_i)$, 由 $t_i \perp \tilde{x}_i$ 可知 $\tilde{x}_i^H t_i = 0$, 从中得到 $\alpha = 1/\tilde{x}_i^H T^{-1}(\theta_i) p_i$, 在预处理过程中若取 $T(\theta_i)$ 的对角矩阵作为 $T(\theta_i)$ 的近似, 假设 $T_{ii}(i = 1, \dots, n)$ 是 $T(\theta_i)$ 的第 i 个对角元, 则 $\alpha = 1/(\tilde{x}_i^H \text{diag}(T_{11}^{-1}, \dots, T_{nn}^{-1})(2\theta_i M + C)\tilde{x}_i)$, 也即 $\alpha = 1/(\tilde{x}_i^H \text{diag}(T_{11}^{-1}, \dots, T_{nn}^{-1})(2\theta_i W_{Mi} + W_{Ci})s_i)$, 因此节点机 P_j 可以独立计算 $\beta_{ip_j} = (\tilde{x}_{ip_j}^H \text{diag}(T_{p_j 1}^{-1}, \dots, T_{p_j m_j}^{-1})(2\theta_i W_{Mp_j} + W_{Cp_j})s_i)$, 然后集中求和得到 $\beta = \sum_{i=1}^{nproc} \beta_{ip_i}$, $\alpha = \beta^{-1}$. 对于 $t_i = \text{diag}(T_{11}^{-1}, \dots, T_{nn}^{-1})(\alpha p_i - \tilde{r}_i)$ 的并行计算, 假设 $t_i = (t_{i1}^T, t_{i2}^T, \dots, t_{ip_{nproc}}^T)^T$, 节点机 P_j 只需要计算 $t_{ip_j}(j = 1, \dots, nproc)$, 若 $T(\theta_i)$ 取其它的近似形式, 采用类似的方法使每个节点机计算 t_i 的一个部分. $V_{i+1} = MGS(V_i, t_i)$ 中, V_i 各列正交规范, 每个节点机可执行 t_i 的一个部分的正交化过程.

4. 数值试验

算例 1. n 阶方阵 K 及 M 的元素各为

$$k_{ij} = \begin{cases} \Delta^{|i-j|} & |i-j| \leq Iw \\ 0 & |i-j| > Iw \\ i & i = j \end{cases}, \quad m_{ij} = \begin{cases} 0.5 & |i-j| = 1, (i, j) = (n, 1) \text{ or } (1, n) \\ 0 & |i-j| > 1 \\ i+1 & i = j \end{cases},$$

矩阵 $C = \alpha K + \beta M + \gamma I$ 其中 $\alpha = 0.6, \beta = 0.4, \gamma = 1000, \Delta = 0.75$, 利用算法 3 在并行计算机 IBM-P650 上使用 Fortran 语言和 MPI 消息传递机制^[7,8], 并行计算二次特征值问题的 l 个按模最小的特征对, 重启子空间的维数取为 l , 子空间的最大维数为 m , 运行时间为 t (以秒表示), 加速比 $S_p = t_1/t_p$, 其中 t_1 表示一个节点机计算的运行时间, t_p 表示 p 个节点机并行计算的时间, η 表示并行效率 (以百分数表示), it 表示迭代次数, 迭代精度 $\varepsilon = 10^{-6}$, 表 1 和表 2 分别表示 l, n 以及 Iw 取不同值时的并行计算时间、加速比和并行效率.

算例 2. 使用算法 3 在 IBM-P650 上并行计算某机翼 (如图 1) 在比例阻尼条件下的二次特征值, 经单元划分后该结构共有节点 334 个, 每节点 6 个自由度, 单元总数 1658 个, 其中杆元 728 个, 壳元 930 个, 采用集中质量矩阵, 刚度矩阵和质量矩阵的维数是 1900, 假设阻尼矩阵 $C = \alpha K + (1 - \alpha)M, \alpha = 0.99$. 表 3 所列是该算例并行计算的时间、加速比和并行效率.

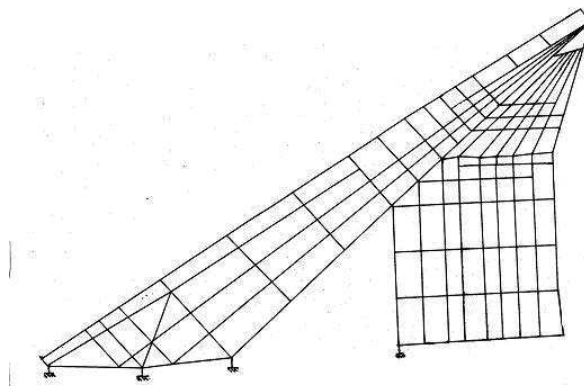


图 1 某型号机翼的上翼面

表 1 $l = 4, m = 12, Iw = 1$ 时计算时间加速比及并行效率

n	nproc	it	t	S_p	η
2000	1	12	0.539		
2000	2	12	0.417	1.28	64
2000	4	12	0.385	1.4	35
2000	8	12	0.356	1.52	18.9
8000	1	12	11.38		
8000	2	12	9.72	1.17	58.5
8000	4	12	6.62	1.72	43
8000	8	12	3.92	2.91	36.3
16000	1	30	132.61		
16000	2	30	77.11	1.72	86
16000	4	30	57.79	2.3	57.5
16000	8	30	32.55	4.07	50.9

表 2 $l = 4, m = 12, Iw = 20$ 时的计算时间加速比和并行效率

n	nproc	it	t	S_p	η
2000	1	20	1.1165		
2000	2	20	0.7986	1.398	69.9
2000	4	20	0.509	2.194	54.8
2000	8	20	0.4163	2.682	33.5
8000	1	20	22.69		
8000	2	20	15.89	1.43	71.4
8000	4	20	9.31	2.44	60.9
8000	8	20	5.83	3.89	48.6
16000	1	20	89.25		
16000	2	20	65.57	1.54	77.2
16000	4	20	32.33	2.76	69
16000	8	20	23.27	3.84	47.9

表 3 某型号机翼的二次特征值问题并行计算情况

nproc	it	t	S_p	η
1	48	12.29		
2	48	7.18	1.71	85.5
4	48	4.19	2.93	73.2
8	48	3.36	3.66	45.7

本文给出了求解 QEP 问题多个特征对的并行 Jacobi-Davidson 方法, 数值试验结果表明, 本文给出的算法具有较高的并行效率, 而且并行计算的效率随计算量的增加有明显的提高.

参 考 文 献

- [1] Sleijpen G L G, Van der Vorst H A. A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems[J]. SIAM J. Matrix Anal. Appl., 1996, 17(2): 401-425.
- [2] 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[J]. Bit, 1996, 36(3): 595-633.
- [3] Betcke T, Voss H. A Jacobi-Davidson-type projection method for nonlinear eigenvalue problems[J]. Future Generation Computer Systems, 2004, 20(3): 363-372.
- [4] Meerbergen K. Locking and restarting quadratic eigenvalue solvers[J]. SIAM J. Sci. Comput., 2001, 22(5): 1814-1839.
- [5] Stathopoulos A, McCombs J R. A parallel, block, Jacobi-Davidson implementation for solving large eigenvalue problems on coarse grain environments[C]. In proceedings of the 1999 International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications. USA: CSREA Press, 1999, 2920-2926.
- [6] 贾仲孝, 孙玉泉. 精化的二次残量迭代法 [J]. 高等学校计算数学学报. 2004, 26(2): 146-155.
- [7] IBM Corp.. User's Guide of IBM XL Fortran. version 8.1, 2003.
- [8] Gropp W, Lusk E, Ashton D, et al.. MPICH2 User's Guide. version 1.0.5, 2006.