文章编号：1005－8893（2002）02－0051－03

GMRES（m）算法停滞情形的一种处理方法*

徐明华，许　波
（江苏石油化工学院 信息科学系，江苏 常州 213016）

摘要：GMRES（m）算法是解大型非对称线性方程组的常用算法，然而该算法在解方程组时，可能发生停滞。为了克服这一缺陷，文中提出了一种在 GMRES（m）算法发生停滞时的处理方法。

关键词：GMRES（m）；Krylov 子空间；非对称线性系统
中图分类号：O 241.6　　文献标识码：A

GMRES（m）算法[1]是解大型非对称线性方程组

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

的最常用算法之一[2]，其中 $A\in R^{n\times n}$非奇异，x，$b\in R^n$。然而当 A 为非正实矩阵时，GMRES（m）可能停滞[1]。

针对这一问题，文献[3～12]提出许多处理方法，如文献[3]提出了基于保存再开始算法过程中的一些有用信息，从而近似得到系数矩阵 A 的一些小特征值对应的特征向量，将其加到 Krylov 子空间，以提高 GMRES（m）的收敛速度。文献[4]提出了基于对再开始 GMRES 算法已得 Krylov 子空间的适当保留与舍弃，来优化再开始算法所得的新的 Krylov 子空间，以此来提高收敛速度。文献[5]提出了自适应的预条件件的 GMRES（m）算法以提高 GMRES（m）的收敛速度，等等。

本文就 GMRES（m）算法停滞时，对方程组（1）给出了一种计算量和内存增加都不大的自适应预处理方法，为方便起见称该算法为 PGMRES（m）。

1 PGMRES（m）介绍

1.1 算法 PGMRES（m）的基础

设算法 GMRES（m）解方程组（1）得到近似解 x_s 时发生停滞，相应的残量设为 $r_s=b-Ax_s$，则有 $r_s\perp\mathrm{span}\{Ar_s,\ A^2r_s,\ \cdots,\ A^mr_s\}$ 成立。为了避免停滞，在上述计算的基础上，针对 r_s，x_s 我们考虑线性方程组

$$QAx=Qr_s \tag{2}$$

其中 Q 为一与 r_s 有关的待定的非奇异矩阵，易见 Q 的适当选取（如：$Q=A^{\mathrm{T}}$）可以保证 GMRES（m）应用于方程组（2）收敛。

为了节省存储单元及计算量，不破坏原来方程组的条件。本文 Q 选取为 Householder 矩阵。利用 n 阶 Householder 矩阵用 n 维向量即可以实现保存以及其与向量相乘的工作量为 $2n+1$ 次乘法和 n 次减法的优点来节省存储单元及计算量。

结论 1　存在 n 阶 Householder 矩阵 Q 使得 GMRES（m）应用于（2）时，所得的残量下降。

证明：令 $Qr_s=r$，$QA=B$，于是方程组（2）转化为

$$Bx=r \tag{3}$$

为了保证 GMRES（m）应用于（3）所得残量下降，我们取 Householder 变换 Q 使得

* 收稿日期：2002－03－15
基金项目：江苏石油化工学院科研基金项目
作者简介：徐明华（1965－），男，江苏姜堰人，副教授，硕士，主要从事数值计算方面的研究。

$r^{\mathrm{T}} \boldsymbol{B} r > 0$ (4)

而 $r^{\mathrm{T}} \boldsymbol{B} r = (\boldsymbol{Q} r_s)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q} \boldsymbol{A} \boldsymbol{Q} r_s = r_s^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{Q} r_s = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} r_s)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q} r_s$。

据Householder矩阵的性质我们可以选取

$w = \frac{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} r_s}{\| \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} r_s \|_2} - \frac{r_s}{\| r_s \|_2}$, $w := w / \| w \|_2$,

令 $\boldsymbol{Q} = I - 2ww^{\mathrm{T}}$,

则向量 $\boldsymbol{Q} r_s$ 平行于向量 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} r_s$，从而有（4）式成立，即GMRES（$m$）应用于（3）式时残量必下降，结论成立。

结论2 方程组（2）与方程组（1）具有相同的条件数。

证明从略。

值得说明的是为了保证不会出现新的停滞现象。$\boldsymbol{Q}$ 应根据所得残量变化情况作相应变化。至此我们可以给出具体的算法过程如下。

1.2 PGMRES（m）

PGMRES（m）算法

（1）选取 x_0 并计算 $r_0 = b - \boldsymbol{A} x_0$ 及 $\beta = \| r_0 \|_2$, $v_1 = r_0 / \beta$

（2）若 r_0 在空间 span $\{\boldsymbol{A} r_0, \boldsymbol{A}^2 r_0, \cdots, \boldsymbol{A}^m r_0\}$ 上的投影在给定精度下不为0，则

①迭代：对 $j = 1, 2, \cdots, m$，做

$h_{i,j} = (\boldsymbol{A} v_j, v_i)$, $i = 1, 2, \cdots, j$

$v_{j+1} = \boldsymbol{A} v_j - \sum_{i=1}^{j} h_{i,j} v_i$

$h_{j+1,j} = \| v_{j+1} \|_2$，且

$v_{j+1} = v_{j+1} / h_{j+1,j}$

②形成近似解：$x_m = x_0 + \boldsymbol{V}_m y_m$，其中 $y = y_m \in R^m$ 使 $\| \beta e_1 - \overline{\boldsymbol{H}}_m y \|_2$ 极小，$\boldsymbol{V}_m = [v_1, v_2, \cdots, v_m]$，$\overline{\boldsymbol{H}}_m$ 为 $(m+1) \times m$ 矩阵，其非零元素由步骤（2）①得到，e_1 为 $(m+1) \times (m+1)$ 阶单位阵的第一列。

③再开始：计算 $r_m := b - \boldsymbol{A} x_m$，如果满足要求则停止，否则，$x_0 := x_m$，$\beta := \| r_m \|_2$，$v_1 := r_m / \beta$，转（2）。

（3）若 r_0 在空间 span $\{\boldsymbol{A} r_0, \boldsymbol{A}^2 r_0, \cdots, \boldsymbol{A}^m r_0\}$ 上的投影在给定精度下为0（在算法实现时，若 $| r_0^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} r_0 |$ 小于某一接近于零的正数，则可近似认为 r_0 在空间 span $\{\boldsymbol{A} r_0, \boldsymbol{A}^2 r_0, \cdots, \boldsymbol{A}^m r_0\}$ 上的投影在给定精度下为0），则计算 $w := \frac{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} r_0}{\| \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} r_0 \|_2} - \frac{r_0}{\| r_0 \|_2}$, $w := w / \| w \|_2$, $v_1 := v_1 - 2(w^{\mathrm{T}} v_1) w$。

④迭代：对 $j = 1, 2, \cdots, m$，计算

$h_{i,j} = (\boldsymbol{Q} \boldsymbol{A} v_j, v_i)$, $i = 1, 2, \cdots, j$（其中 $\boldsymbol{Q} \boldsymbol{A} v_j = \boldsymbol{A} v_j - 2(w^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} v_j) w$）

$v_{j+1} = \boldsymbol{Q} \boldsymbol{A} v_j - \sum_{i=1}^{j} h_{i,j} v_i$

$h_{j+1,j} = \| v_{j+1} \|_2$，且

$v_{j+1} = v_{j+1} / h_{j+1,j}$

⑤形成近似解：$x_m := x_0 + \boldsymbol{V}_m y_m$，其中 $y := y_m \in R^m$ 使 $\| \beta e_1 - \overline{\boldsymbol{H}}_m y \|_2$ 极小，$\boldsymbol{V}_m = [v_1, v_2, \cdots, v_m]$，$\overline{\boldsymbol{H}}_m$ 为 $(m+1) \times m$ 矩阵，其非零元素由步骤（3）④得到，e_1 为 $(m+1) \times (m+1)$ 阶单位阵的第一列。

⑥再开始：计算 $r_m := b - \boldsymbol{A} x_m$，如果满足要求则停止，否则，$x_0 := x_m$，$\beta := \| r_m \|_2$，$v_1 := r_m / \beta$，转（2）。

说明：如果 $h_{j+1,j} = 0$ 即算法出现中断，则由文献[1]知此时我们可以得到方程组（1）的精确解。

1.3 算法分析

由上可知每确定一次 $\boldsymbol{Q}$，我们需计算一次 $\boldsymbol{A}$ 的转置与向量的乘法，而且每个 $\boldsymbol{Q}$ 均可用一个向量来保存。在计算量上，通过比较可知，用GMRES（m）解线性方程组（1）与（2）的主要区别在于矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 与向量相乘的工作量不同，每相乘一次后者比前者增加次乘法及 n 次减法。因此，用这样的代价来保持GMRES（m）算法的优点，并避免停滞无疑是值得的。

2 数值实验

在这一段里我们将给出两个数值例子来验证PGMRES（m）在GMRES（m）停滞时的收敛效果。

例1 设线性方程组（1）中 $\boldsymbol{A} = \text{Toeplitz}[1, \underline{-3}, 1, 1, 1] \in R^{300 \times 300}$，其中有下划线的元素是矩阵的主对角元。取 $b = \boldsymbol{A}[1, 1, \cdots, 1]^{\mathrm{T}}$，$x_0 = [0, 0, \cdots, 0]^{\mathrm{T}}$。用 $R_{es} = \log_{10}(\| b - \boldsymbol{A} x_m \|_2 / \| b \|_2)$ 表示相对残量范数的对数，图1给出了算法GMRES（5）与PGMRES（5）解此线性方

程组再开始次数 K 和相对残量范数的对数 R_{es} 的关系。

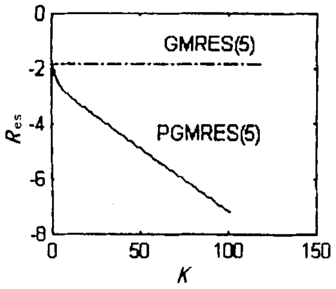

图 1　K 与 R_{es} 的关系

例 2　同上例，若 $\boldsymbol{A}$ = Toeplitz [1, $\underline{-2}$, 1, 1] $\in R^{300\times 300}$，其中有下划线的元素是矩阵的主对角元。仍取 $b=\boldsymbol{A}[1, 1, \cdots, 1]^T$，$x_0=[0, 0, \cdots, 0]^T$。图 2 给出了算法 GMRES（5）与 PGMRES（5）解此线性方程组再开始次数 K 和相对残量范数的对数 R_{es} 的关系。

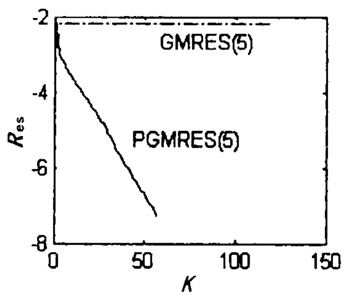

图 2　K 与 R_{es} 的关系

值得说明的是，大量数值实验表明算法 PGMRES（m）在许多情形下的确能避免算法 GMRES（m）的停滞现象，但也存在一些问题，使得 PGMRES（m）收敛的较慢。

参考文献：

[1] Saad Y, Schultz M H. GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems [J]. SIAM J Sci Stat Comp, 1986, 7（3）: 856—869.

[2] Noel M Nachtigal, Satish C Reddy, Lloyd N Trefethen. How Fast Are Nonsymmetric Matrix Iterations? [J]. SIAM J Matrix Anal Appl, 1992, 13（3）: 778—795.

[3] Ronald B Morgan. A Restarted GMRES Method Augmented with Eigenvectors [J]. SIAM Matrix Anal Appl, 1995, （16）: 1 154—1 171.

[4] Eric De Sturler. Truncation Strategies for Optimal Krylov Subspace Methods [J]. SIAM J Numer Anal, 1999, 36（3）: 864—889.

[5] Baglama J, Calvetti D, Golub G H, et al. Adaptively Preconditioned GMRES Algorithms [J]. SIAM J Sci Comput, 1998, 20（1）: 243—269.

[6] Jinxi Zhao. The Generalized Cholesky Factorization Method for Saddle Point Problems [J]. Applied Mathematics and Computation, 1998, 92: 49—58.

[7] Jinxi Zhao. A Class of Direct Methods for Solving the Constrained and Weighted Linear Least Squares Problems [J]. Journal of Nanjing University（Natural Sciences）, 1996, 32（3）: 378—386.

[8] Elsenstat S C, Elman S C, Schultz M H. Variational Iterative Methods for Nonsymmetric Systems of Linear Equations [J]. SIAM J Numer Anal, 1983, 20（2）: 345—357.

[9] Kasenally E M, Simoncini V. Analysis of a Minimum Perturbation Algorithm for Nonsymmetric Linear Systems [J]. SIAM J Numer Anal, 1997, 34（1）: 48—66.

[10] Zhihao Cao, Guangxi Chen, Xiaodong Hou. A Convergent Restarted Algorithm [J]. Journal of Fudan University（Natural Science）, 1997, 36（6）: 643—651.

[11] Dai Hua. Two Algorithms for Symmetric Linear Systems with Multiple Right—handsides [J]. Numerical Mathematics a Journal of Chinese Universities, 2000, 9（1）: 91—110.

[12] Xu Minghua. MGMRES（m）: A Modified GMRES（m）Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems [J]. Journal of Nanjing University（Natural Sciences）, 2000, 36（1）: 45—50.

A Method for Handling the Stagnation of GMRES（m）

XU Ming—hua, XU Bo

（Department of Information Science, Jiangsu Institute of Petrochemical Technology, Changzhou 213016, China）

Abstract: GMRES algorithm is popular for solving large nonsymmetric linear equations $\boldsymbol{A}x=b$. It is restarted to reduce storage and computing costs. However, it is possible to show that the restarted GMRES method may not converge, i. e. being stationary. To remedy this difficulty, a new method by means of choosing a proper matrix $\boldsymbol{Q}$ and solving linear systems $\boldsymbol{QA}x=\boldsymbol{Q}r_s$, where $r_s=b-\boldsymbol{A}x_s$, is discussed in this paper.

Key words: GMRES（m）; Krylov subspace; nonsymmetric linear systems