第 20 卷 第 2 期
2008 年 6 月

江 苏 工 业 学 院 学 报
JOURNAL OF JIANGSU POLYTECHNIC UNIVERSITY

Vol. 20 No. 2
Jun. 2008

文章编号：1673 - 9620 (2008) 02 - 0056 - 03

一种预条件的再开始的 GMRES 算法*

童凯郁
(江苏工业学院 数理学院，江苏 常州 213164)

摘要：由 Saad 和 Schultz 提出的再开始 GMRES 算法是一求解大规模线性系统问题的常用的迭代算法。在再开始的 GMRES 算法中引入预条件技术，是改进再开始 GMRES 算法的一个手段。数值实验表明引入这种预条件技术的再开始 GMRES 算法是非常有效的。

关键词：GMRES 算法；Krylov 子空间法；迭代算法；预条件
中图分类号：O 151.2 **文献标识码**：A

A Preconditioner for the Restarted GMRES Method

TONG Kai - yu
(School of Physics and Mathematics, Jiangsu Polytechnic University, Changzhou 213164, China)

Abstract: The restarted GMRES algorithm proposed by Saad and Schultz is one of the most popular iterative methods for the solution of large linear systems. This algorithm is particularly attractive when a good preconditioner is obtained. This paper describes a new method for determining preconditioners. Numerical results indicate that the new preconditioner is very effective.

Key words: GMRES; Krylov subspace methods; iterative method; preconditioner

1 问题提出

考虑如下线性方程

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

其中 $A \in R^{n\times n}$ 是一个稀疏的、非对称的、非奇异的系数矩阵，$x, b \in R^n$。再开始的 GMRES 算法，通常记为 GMRES (m)，是 GMRES 算法迭代到一定步数（例如 m 步，m 通常远远小于问题的规模 n）后，以所得迭代解作为初始近似解重新开始 GMRES 算法，这样就可以避免由于迭代步数增大所带来的计算量及存储量增大的问题。该方法的不足之处在于它降低了原来 GMRES 算法的鲁棒性，无法保证算法的收敛性。另外，由于再开始算法的收敛可能变得非常慢，可能会由于 m 的选取问题影响 GMRES 算法对某些问题的好的收敛性[1]。由于 GMRES (m) 存在这些不足，人们试着寻找各种处理方法。一种做法就是从预条件角度出发，设法改进问题的预条件矩阵，已经有很多的学者对预条件技术进行了研究[2~8]。

2 预条件矩阵的构建

首先将方程 (1) 线性系统表示成如下的形式

$$\begin{bmatrix} I & A \\ -A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^* \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix} \tag{2}$$

其中 $I \in R^{n\times n}$ 是单位矩阵，而 $u^* \in R^n$ 是一个给定的向量，并且 $f = u^* + b$，$g = -A^Tu^* \in R^n$。因为

* **收稿日期**：2007 - 10 - 16
作者简介：童凯郁 (1978 -)，女，江苏常州人，助教。

A 是非奇异的，所以系统（2）存在唯一的解 $z^* = \begin{bmatrix} u^* \\ x^* \end{bmatrix}$，其中 x^* 是方程（1）的解。

令 $B = \begin{bmatrix} I & A \\ -A^T & 0 \end{bmatrix}$，利用 GMRES（$m$）方法来求解系统（2），可得如下的结论：

命题 2.1：令 β_i，$i = 1, 2, \cdots, n$ 表示 A^TA 的特征值，且设

$$\beta_1 \geq \beta_2 \geq \cdots \geq \beta_n \geq 1/4 \tag{3}$$

那么矩阵 B 的特征值具有正的实部。

证明：由

$$|\lambda I_1 - B| = \begin{vmatrix} (\lambda - 1) I & -A \\ A^T & \lambda I \end{vmatrix} \tag{4}$$

其中 $I_1 \in R^{2n \times 2n}$ 是一个单位矩阵。如果 $\lambda = 1$ 是矩阵 B 的特征值，由（4）式可得到 $\begin{vmatrix} 0 & -A \\ A^T & I \end{vmatrix}$，因为矩阵 A 是非奇异的，这就得到一个矛盾。由此得到 $\lambda \neq 1$。

由（4）式和 $\lambda \neq 1$ 可得：

$$|\lambda I_1 - B| = \begin{vmatrix} (\lambda - 1) I & -A \\ 0 & \lambda I + (\lambda - 1)^{-1} A^T A \end{vmatrix} = |(\lambda - 1)\lambda I + A^T A|。$$

如果 $\{\lambda_{i,1}, \lambda_{i,2} \mid i = 1, 2, \cdots, n\}$ 表示 B 的特征值，那么 $\lambda_{i,j}$，$j = 1, 2$ 可以通过求解下列方程得到

$$(\lambda_{i,j} - 1)\lambda_{i,j} + \beta_i = 0,\ i = 1, 2, \cdots n,\ j = 1, 2 \tag{5}$$

求解（5）式，可得

$$\lambda_{i,1} = \frac{1 + \sqrt{1 - 4\beta_i}}{2} \tag{6}$$

$$\lambda_{i,2} = \frac{1 - \sqrt{1 - 4\beta_i}}{2} \tag{7}$$

再由（3）式可知结论得证。

由文献［1］和命题 2.1，可得到下面的推论：

推论 2.1：在命题 2.1 的条件下，使用再开始的 GMRES 方法求解系统（2）将会得到一个近似解的序列，该序列收敛到系统（2）的精确解，从而可以得到收敛于方程（1）精确解的近似解序列。

由文献［7，8］，对于下列形式实矩阵 $B = \begin{bmatrix} I & A \\ -A^T & 0 \end{bmatrix}$ 的预条件矩阵 P 可以写成以下形式：$\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -A^TA \end{bmatrix}$。并且 $P^{-1}B$ 具有至多 4 次的最小多项式（见文献［7，8］），因此，若计算没有舍入误差的情况下，应用 Krylov 子空间方法如 GMRES 方法求解系数矩阵为 $P^{-1}B$ 线性系统至多需要 4 次迭代。

下面用再开始的 GMRES 算法来求解预条件线性系统方程

$$P^{-1}Bz = P^{-1}\begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix} \tag{8}$$

根据命题 2.1，如果 $z^* = \begin{bmatrix} u^* \\ x^* \end{bmatrix}$，其中 $u^*, x^* \in R^n$ 是（8）式的解，那么是方程（1）的解。然而，利用 GMRES（m）求解（8）式的过程需要求解下面的线性系统：

$$Pr = w \tag{9}$$

$$r = P^{-1}w \tag{10}$$

其中 $w \in R^{2n \times 1}$。由于

$$P = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -A^TA \end{bmatrix} \tag{11}$$

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -(A^TA)^{-1} \end{bmatrix} \tag{12}$$

其中 A^TA 是对称正定矩阵。那么利用 A^TA 的不完全的 Cholesky 分解可以很容易的得到 P^{-1} 的近似逆矩阵或得到（9）式的近似解。

令 C 是 A^TA 的不完全 Cholesky 分解因式，有

$$P \approx \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -C \end{bmatrix} = Q \tag{13}$$

值得提一下的是，虽然 Q 是 $2n \times 2n$ 矩阵，但由于矩阵 Q 结构的特殊性，在实际计算时，可以节省存储单元，并且 Q^{-1} 的计算主要工作在于计算 C^{-1}。在上述分析基础上，给出了求解方程（1）的预条件的再开始的 GMRES 算法。为了方便，用 PGMRES（m）来表示这个算法。

算法 2.1：求解系统（1）的 PGMRES（m）算法

①开始：给定正整数 m（$m < n$），选择 z_0，计算 $r_0 = Q^{-1}\left(\begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix} - Bz_0\right)$，令 $\beta = \| r_0 \|$，$v_1 = r_0/\beta$。

②迭代：For $j = 1, 2, \cdots, m$ 计算 $w = Q^{-1}Bv_j$，

$h_{i,j} = (w, v_i)$，$i = 1, 2, \cdots, j$，

$\bar{v}_{j+1} = w - \sum_{i=1}^{j} h_{i,j} v_i$，

$h_{j+1,j} = \| \bar{v}_{j+1} \|$，

$v_{j+1} = \bar{v}_{j+1} / h_{j+1,j}$。

③产生系统（2）的近似解：

$z_m = z_0 + V_m y_m$，其中 $V_m = [v_1, v_2, \cdots, v_m]$，$y_m$ 使得 $\| \beta e_1 - H_m y \|$，$y \in R^m$ 取得极小值。H_m 是

$(m+1)\times m$ 的矩阵，它的所有非零元素 $h_{i,j}$ 均由第 2 步给出，e_1 是 $(m+1)\times(m+1)$ 的单位矩阵的第一列。

④产生方程 (1) 的近似解：

$x_m=[z^{(n+1)}, z^{(n+2)}, \cdots, z^{2n}]^T$，其中 $z_m=[z^{(1)}, z^{(2)}, \cdots, z^{(2n)}]^T$。

⑤重新开始：计算 $r_m=b-Ax_m$，如果满足精度要求，则停止；否则计算 $r_m=Q^{-1}\left(\begin{bmatrix} f\\ g\end{bmatrix}-Bz_m\right)$，令 $z_0:=z_m$，$r_0:=r_m$，$\beta=\|r_0\|$，$v_1:=v_0/\beta$，并转到第 2 步。

说明：上述算法在实现时，要注意利用矩阵 B，Q 的特殊结构，减少不必要的存储单元和矩阵乘向量的计算量。

3 数值试验

通过两个数值实验来比较 PGMRES (m) 和 GMRES (m) 算法。在数值试验中，将使用软件 Matlab 的函数 cholinc 在 drop tolerance = 1e - 2 的条件下，产生 A^TA 的不完全的 Cholesky 分解因子，即：

$$C=\text{cholinc}(A^TA, 1e-2) \quad (14)$$

例 1：假设 Toeplitz 矩阵 A = Toeplitz ([1, <u>- 3.5</u>, 1, 1, 1]) $\in R^{100\times100}$ 是线性系统 (1) 的系数矩阵，其中矩阵的对角线元素是标注了下划线的数字。令 $b=A[1, 1, \cdots, 1]^T$，$m=4$，初始的近似解为 $x_0=[0, 0, \cdots, 0]^T\in R^{100}$，使用 GMRES (m) 算法求解方程 (1)。同时令初始解为 $z_0=[0, 0, \cdots, 0]^T\in R^{200}$，使用算法 PGMRES (m) 求解方程 (1)。近似解的相对残量的对数为 $\log_{10}(\|b-Ax_m\|/\|b\|)$。例 1 的计算结果见图 1。

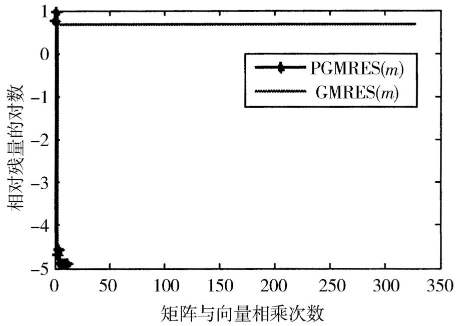

图 1 例 1 的数值结果

Fig. 1 The numerical results of example 1

例 2：假设 Toeplitz 矩阵 A = Toeplitz ([1, <u>2</u>, 1, 1, 1]) $\in R^{200\times200}$ 是线性系统 (1) 的系数矩阵，其中矩阵的对角线元素是标注了下划线的数字。令 $b=A[1, 1, \cdots, 1]^T$，$m=4$，初始的近似解为 $x_0=[0, 0, \cdots, 0]^T\in R^{200}$，使用 GMRES (m) 算法求解方程 (1)。同时令初始解为 $z_0=[0, 0, \cdots, 0]^T\in R^{400}$，使用算法 PGMRES (m) 求解方程 (1)。例 2 的计算结果见图 2。

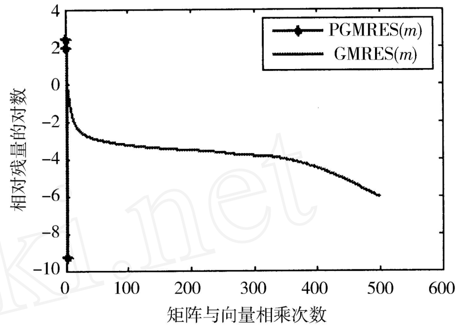

图 2 例 2 的数值结果

Fig. 2 The numerical results of example 2

上述数值实验表明，PGMRES (m) 对于一些问题比通常的 GMRES (m) 算法要非常有效，可以节省迭代次数，避免 GMRES (m) 算法可能出现的停滞现象，并保持 GMRES (m) 算法的优点。数值试验同时也表明对于某些病态的条件，由于舍入误差比较难控制，导致算法 PGMRES (m) 的收敛性也可能会比较缓慢。

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 Statist Comput, 1986, 7: 856 - 869.

[2] Axelsson O, Vassilevski P S. A black box generalized conjugate gradient solver with inner iterations and variable - step preconditioning [J]. SIAM J Matrix Anal Applic, 1991, 12 (4): 625 - 644.

[3] Saad Y, A flexible inner - outer preconditioned GMRES algorithm [J]. SIAM J Sci Statist Comput, 1993, 14: 461 - 469.

[4] Van der Vorst H A, Vuik C. GMRESR: A family of nested GMRES method [J]. Num Lin Alg Appl, 1994, 1: 369 - 386.

[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] Chan T F, Chow E, Saad T, et al. Preserving symmetry in preconditioned Krylov subspace methods [J]. SIAM J SCI Comput, 1998, 20 (2): 568 - 581.

[7] Murphy M F, Golub G H, Wathen A J. A note on preconditioning for indefinite linear systems [J]. SIAM J Sci Comput, 2000, 21 (6): 1 969 - 1 972.

[8] ILSE C F Ipsen. Anote on preconditioning Nonsymmetric Matrices [J]. SIAM J Sci Comput, 2001, 23 (3): 1 050 - 1 051.