

一种加权块 simpler GMRES 算法及应用*

仲红秀, 吴鑫斌

(江南大学 理学院, 江苏 无锡 214122)

摘要:【目的】为了更加稳定地快速求解非对称多右端项线性方程组, 解决实际应用问题。【方法】有效利用加权策略和分析基底条件数, 对块 simpler GMRES 方法进行了改进。【结果】提出加权块 simpler GMRES 算法, 并对算法的数值稳定性进行分析, 得出初始块残量的单位化是新算法数值稳定的关键, 以及加权矩阵的一个不变性质。【结论】数值算例表明新算法具有良好的稳定性, 能快速稳定地求解目标方程组。

关键词:线性方程组; 块 simpler GMRES 方法; 加权策略

中图分类号: O241.6

文献标志码: A

文章编号: 1672-6693(2019)03-0078-07

本文主要研究如下方程组的求解问题:

$$AX = B, \tag{1}$$

其中 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 是非对称非奇异矩阵, $X, B \in \mathbf{R}^{n \times p}$, 这里 p 是远小于 n 的正整数。问题(1)常见于许多科学与工程计算问题中, 如流体力学、控制理论、电磁场散射等等^[1-3]。当 $p=1$ 时, 问题(1)即为常见的单右端项线性方程组:

$$Ax = b. \tag{2}$$

GMRES 算法^[4]是计算问题(2)最有效的迭代方法之一, 具有收敛快、数值稳定性高的优点。Walker 和 Zhou^[5]在 20 世纪 90 年代提出了 simpler GMRES 算法(SGMRES), 该方法是 GMRES 算法的一种变形。由于 SGMRES 算法避免了每次迭代最后对一个上 Hessenberg 矩阵进行 QR 分解, 因此比 GMRES 算法节约了计算量。但由于对某些问题, SGMRES 算法并不收敛, 数值稳定性稍差。文献[6]通过引用加权技术, 提出了加权 SGMRES 算法(WSGMRES), 有效增强了 SGMRES 算法的收敛效果。

块 GMRES 算法(BGMRES)^[7]可看作是 GMRES 算法的块推广, 可有效求解问题(1)。在文献[8]中, Liu 和 Zhong 提出了在数学上等价于块 GMRES 算法的块 simpler GMRES 算法(BSGMRES)。类似于 SGMRES 算法, BSGMRES 算法避免了每次迭代的最后对一个块上 Hessenberg 矩阵进行 QR 分解, 因此比 BGMRES 算法节约了不少运算量。但同样对某些问题, BSGMRES 算法会收敛很慢甚至不收敛, 因此对 BSGMRES 算法作一些改进来增强收敛效果具有实际意义。

受加权技术的启发, 本文将对 BSGMRES 算法进行改进, 提出收敛效果更优的加权块 simpler GMRES 算法(WBSGMRES), 并对算法的数值稳定性进行分析, 得出初始块残量的单位化对算法稳定性有关键影响。本文还研究了新算法的一个不变性质, 即: 新算法中的加权矩阵乘上一个正实数后并不改变算法的解及收敛效果。最后数值算例验证了新算法的优势。

文中使用如下记号: $\|\cdot\|_2$ 表示向量或矩阵的 2-范数; $\kappa_2(W) = \sigma_{\max}(W) / \sigma_{\min}(W)$ 表示非奇异矩阵 W 的 2-条件数, 其中 $\sigma_{\max}(W)$ 和 $\sigma_{\min}(W)$ 分别为 W 的最大和最小奇异值; I 和 0 分别表示合适大小的单位矩阵和零矩阵; $E_i = [0, \dots, I_p, \dots, 0]^T$ 表示单位矩阵的第 i 个块列, 块大小为 p 。本文主要在实数域中进行讨论, 所有结果也可以推广至复数域中。

* 收稿日期: 2018-09-14 修回日期: 2018-11-02 网络出版时间: 2019-05-09 19:30
资助项目: 国家自然科学基金(No. 11701225); 中央高校基本科研业务费专项资金(No. JUSRP11719); 江苏省自然科学基金(No. BK20170173)
第一作者简介: 仲红秀, 女, 讲师, 博士, 研究方向为大规模科学与工程计算, E-mail: hxzhong@jiangnan.edu.cn
网络出版地址: http://kns.cnki.net/kcms/detail/50.1165.N.20190509.1930.040.html

1 加权块 simpler GMRES 算法 (WBSGMRES)

本节首先介绍块 simpler GMRES 算法 (BSMGRES)。设 $\mathbf{X}_0 \in \mathbf{R}^{n \times p}$ 为初始解,且使得 $\mathbf{R}_0 = \mathbf{B} - \mathbf{A}\mathbf{X}_0$ 列满秩。作 QR 分解 $\mathbf{R}_0 = \tilde{\mathbf{R}}_0 \mathbf{W}_0$, 则 \mathbf{W}_0 非奇异,且 $\tilde{\mathbf{R}}_0^T \tilde{\mathbf{R}}_0 = \mathbf{I}$ 。由 \mathbf{A} 非奇异可知 QR 分解 $\mathbf{A} \tilde{\mathbf{R}}_0 = \mathbf{V}_1 \mathbf{U}_{11}$ 中 \mathbf{U}_{11} 非奇异,其中 $\mathbf{V}_1^T \mathbf{V}_1 = \mathbf{I}$ 。对 \mathbf{V}_1 作 $m-1$ 步块 Arnoldi 过程,则有 $\mathbf{A} \mathbf{V}_{m-1} = \sum_{i=1}^m \mathbf{V}_i \mathbf{U}_{im}$, 且得到块 Krylov 子空间 $K_m(\mathbf{A}, \mathbf{R}_0) = \text{span}\{\mathbf{R}_0, \mathbf{A}\mathbf{R}_0, \dots, \mathbf{A}^{m-1} \mathbf{R}_0\}$ 的一组基 $\mathbf{\Omega}_m = [\tilde{\mathbf{R}}_0, \mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_{m-1}]$, 以及关系式:

$$\mathbf{A} \mathbf{\Omega}_m = \mathbf{\Phi}_m \mathbf{\Pi}_m, \quad (3)$$

其中: $\mathbf{\Phi}_m = [\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_m]$ 为列正交规范矩阵, $\mathbf{\Pi}_m = [\mathbf{U}_{ij}] \in \mathbf{R}^{m \times m}$ ($i, j = 1, \dots, m$) 是块上三角阵。为了便于分析, 本文假设 $K_m(\mathbf{A}, \mathbf{R}_0)$ 的维数为 $m \rho$, 则 $\mathbf{\Pi}_m$ 非奇异^[8]。BSGMRES 是在仿射子空间 $\mathbf{X}_0 + K_m(\mathbf{A}, \mathbf{R}_0)$ 中寻找近似解 $\mathbf{X}_m = \mathbf{X}_0 + \mathbf{\Omega}_m \mathbf{Y}_m$, 满足如下 Petrov-Galerkin 条件:

$$\mathbf{R}_m = \mathbf{B} - \mathbf{A}\mathbf{X}_m \perp \mathbf{A} K_m(\mathbf{A}, \mathbf{R}_0) = \text{span}\{\mathbf{\Phi}_m\},$$

即: $0 = \mathbf{\Phi}_m^T \mathbf{R}_m = \mathbf{\Phi}_m^T (\mathbf{R}_0 - \mathbf{A} \mathbf{\Omega}_m \mathbf{Y}_m)$, 利用(3)式可得 $\mathbf{\Phi}_m^T \mathbf{R}_0 = \mathbf{\Pi}_m \mathbf{Y}_m$ 。从而 $\mathbf{Y}_m = \mathbf{\Pi}_m^{-1} \mathbf{\Psi}_m$, 其中 $\mathbf{\Psi}_m = [\mathbf{S}_1^T, \dots, \mathbf{S}_m^T]^T$, $\mathbf{S}_i = \mathbf{V}_i^T \mathbf{R}_0$, $i = 1, \dots, m$ 。

下面介绍加权定义。设 $\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$ 是一个对角阵, 其中 $d_i > 0$, $i = 1, \dots, n$ 。定义两向量 \mathbf{D} -内积^[6]:

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v})_{\mathbf{D}} = \mathbf{v}^T \mathbf{D} \mathbf{u} = \sum_{i=1}^n d_i u_i v_i, \quad \forall \mathbf{u} = [u_1, \dots, u_n]^T, \mathbf{v} = [v_1, \dots, v_n]^T \in \mathbf{R}^n.$$

若 $(\mathbf{u}, \mathbf{v})_{\mathbf{D}} = 0$, 则称 \mathbf{u}, \mathbf{v} 是 \mathbf{D} -正交的, 记为 $\mathbf{u} \perp_{\mathbf{D}} \mathbf{v}$ 。定义向量 \mathbf{D} -范数^[5]:

$$\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{D}} = \sqrt{(\mathbf{u}, \mathbf{u})_{\mathbf{D}}} = \sqrt{\sum_{i=1}^n d_i u_i^2}, \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbf{R}^n.$$

定义两矩阵 \mathbf{D} -内积:

$$(\mathbf{U}, \mathbf{V})_{\mathbf{D}} = \mathbf{V}^T \mathbf{D} \mathbf{U}, \quad \forall \mathbf{U} \in \mathbf{R}^{n \times m}, \mathbf{V} \in \mathbf{R}^{n \times p}.$$

定义矩阵 \mathbf{D} -范数^[6]:

$$\|\mathbf{U}\|_{\mathbf{D}} = \sqrt{\lambda_{\max}(\mathbf{U}^T \mathbf{D} \mathbf{U})}, \quad \forall \mathbf{U} \in \mathbf{R}^{n \times m},$$

其中 $\lambda_{\max}(\mathbf{U}^T \mathbf{D} \mathbf{U})$ 表示 $\mathbf{U}^T \mathbf{D} \mathbf{U}$ 的最大特征值。定义矩阵 \mathbf{D} -条件数:

$$\kappa_{\mathbf{D}}(\mathbf{U}) = \frac{\sqrt{\lambda_{\max}(\mathbf{U}^T \mathbf{D} \mathbf{U})}}{\sqrt{\lambda_{\min}(\mathbf{U}^T \mathbf{D} \mathbf{U})}}, \quad \forall \mathbf{U} \in \mathbf{R}^{n \times m}, \text{ 满足 } \mathbf{U} \text{ 列满秩,}$$

其中 $\lambda_{\min}(\mathbf{U}^T \mathbf{D} \mathbf{U})$ 表示 $\mathbf{U}^T \mathbf{D} \mathbf{U}$ 的最小特征值。接下来介绍对加权 QR 分解 (WQR) 和 m 步加权块 Arnoldi 过程 (WBArnoldi)。

算法 1 加权 QR 分解 (WQR)

1) 选取列满秩矩阵 $\mathbf{R} = [\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_p] \in \mathbf{R}^{n \times p}$;

2) for $k = 1, \dots, p$, do

$$\tilde{\mathbf{r}}_k = \mathbf{r}_k;$$

for $j = 1, \dots, k-1$

$$\omega_{jk} = (\tilde{\mathbf{r}}_k, \mathbf{r}_j)_{\mathbf{D}};$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_k = \tilde{\mathbf{r}}_k - \mathbf{r}_j \cdot \omega_{jk};$$

end

$$\omega_{kk} = \|\tilde{\mathbf{r}}_k\|_{\mathbf{D}};$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_k = \tilde{\mathbf{r}}_k / \omega_{kk};$$

end

注 1 若令 $\tilde{\mathbf{R}} = [\tilde{\mathbf{r}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{r}}_p]$, $\mathbf{W} = [\omega_{ij}]$, $i, j = 1, \dots, p$, 则算法 1 产生关系式 $\mathbf{R} = \tilde{\mathbf{R}} \mathbf{W}$, 且 $\tilde{\mathbf{R}}^T \mathbf{D} \tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{I}$, $\tilde{\mathbf{R}}$ 列满秩, \mathbf{W} 非奇异。

算法 2 加权块 Arnoldi 过程 (WBArnoldi)

1) 选取列满秩矩阵 $\mathbf{V}_1 \in \mathbf{R}^{n \times p}$, 满足 $\mathbf{V}_1^T \mathbf{D} \mathbf{V}_1 = \mathbf{I}$;

2) for $k=1, \dots, m$, do

$$\mathbf{V} = \mathbf{A}\mathbf{V}_k;$$

for $j=1, \dots, k$

$$\mathbf{U}_{jk} = (\mathbf{V}, \mathbf{V}_j)_D;$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{V} - \mathbf{V}_j \mathbf{U}_{jk};$$

end

对 \mathbf{V} 做 WQR 分解: $\mathbf{V} = \mathbf{V}_{k+1} \mathbf{U}_{k+1, k};$

end

注 2 易见, 算法 2 产生关系式 $\mathbf{A}[\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_m] = [\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_{m+1}] \begin{bmatrix} \mathbf{U}_{11} & \cdots & \mathbf{U}_{1m} \\ \mathbf{U}_{21} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \mathbf{U}_{mm} \\ 0 & \cdots & \mathbf{U}_{m+1, m} \end{bmatrix}.$

接下来将详细介绍本文的主要算法: 加权块 simpler GMRES 算法 (WBSGMRES)。为方便叙述, 下面仍沿用 BSGMRES 算法中的记号。对 \mathbf{R}_0 作 WQR 分解: $\mathbf{R}_0 = \tilde{\mathbf{R}}_0 \mathbf{W}_0$, 则 \mathbf{W}_0 非奇异。由 \mathbf{A} 非奇异知, WQR 分解 $\mathbf{A}\tilde{\mathbf{R}}_0 = \mathbf{V}_1 \mathbf{U}_{11}$ 中 \mathbf{U}_{11} 非奇异。对 \mathbf{V}_1 作 $m-1$ 步 WBArnoldi 过程, 则有 $\mathbf{A}\mathbf{V}_{m-1} = \sum_{i=1}^m \mathbf{V}_i \mathbf{U}_{im}$ 。令 $\mathbf{\Omega}_m = [\tilde{\mathbf{R}}_0, \mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_{m-1}]$, $\mathbf{\Phi}_m = [\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_m]$, $\mathbf{\Pi}_m = [\mathbf{U}_{ij}]$, 则同样有关系式:

$$\mathbf{A}\mathbf{\Omega}_m = \mathbf{\Phi}_m \mathbf{\Pi}_m,$$

且 $\mathbf{\Phi}_m^T \mathbf{D} \mathbf{\Phi}_m = \mathbf{I}$, 显然 $\mathbf{\Omega}_m$ 是 $K_m(\mathbf{A}, \mathbf{R}_0)$ 的一组基, $\mathbf{\Pi}_m$ 非奇异。新算法在仿射子空间 $\mathbf{X}_0 + K_m(\mathbf{A}, \mathbf{R}_0)$ 中寻找近似解 $\mathbf{X}_m = \mathbf{X}_0 + \mathbf{\Omega}_m \mathbf{Y}_m$, 满足如下 Petrov-Galerkin 条件:

$$\mathbf{R}_m = \mathbf{B} - \mathbf{A}\mathbf{X}_m \perp_D \mathbf{A}K_m(\mathbf{A}, \mathbf{R}_0) = \text{span}\{\mathbf{\Phi}_m\}, \quad (4)$$

即: $0 = \mathbf{\Phi}_m^T \mathbf{D} \mathbf{R}_m = \mathbf{\Phi}_m^T \mathbf{D} (\mathbf{R}_0 - \mathbf{A}\mathbf{\Omega}_m \mathbf{Y}_m)$, 故 $\mathbf{\Phi}_m^T \mathbf{D} \mathbf{R}_0 = \mathbf{\Pi}_m \mathbf{Y}_m$ 。从而 $\mathbf{Y}_m = \mathbf{\Pi}_m^{-1} \mathbf{\Psi}_m$, 其中 $\mathbf{\Psi}_m = [\mathbf{S}_1^T, \dots, \mathbf{S}_m^T]^T$, $\mathbf{S}_i = \mathbf{V}_i^T \mathbf{D} \mathbf{R}_0$, $i=1, \dots, m$, 且

$$\mathbf{R}_m = \mathbf{B} - \mathbf{A}\mathbf{X}_m = \mathbf{R}_0 - \mathbf{A}\mathbf{\Omega}_m \mathbf{Y}_m = \mathbf{R}_0 - \mathbf{\Phi}_m \mathbf{\Pi}_m \mathbf{Y}_m = \mathbf{R}_0 - \sum_{i=1}^m \mathbf{V}_i \mathbf{S}_i = \mathbf{R}_{m-1} - \mathbf{V}_m \mathbf{S}_m, \quad (5)$$

又由(4)式知 $\mathbf{R}_m \perp_D \mathbf{V}_m$, 则对(5)式两边同时左乘 $\mathbf{V}_m^T \mathbf{D}$, 可得 $\mathbf{S}_m = \mathbf{V}_m^T \mathbf{D} \mathbf{R}_{m-1}$, 故可用 $\mathbf{S}_i = \mathbf{V}_i^T \mathbf{D} \mathbf{R}_{i-1}$ 来更新 \mathbf{S}_i , $i=1, \dots, m$, 从而避免存储初始块残量 \mathbf{R}_0 。整理上述过程即得加权块 simpler GMRES 算法 (WBSGMRES)。

算法 3 加权块 simpler GMRES 算法 (WBSGMRES)

1) 选取 t_{tol} 和 \mathbf{X}_0 , 满足 $\mathbf{R}_0 = \mathbf{B} - \mathbf{A}\mathbf{X}_0$ 列满秩, 若 $\|\mathbf{R}_0\|_F \leq t_{\text{tol}}$, 则 \mathbf{X}_0 即是解, 否则计算 WQR 分解: $\mathbf{R}_0 = \tilde{\mathbf{R}}_0 \mathbf{W}_0$ 和 $\mathbf{A}\tilde{\mathbf{R}}_0 = \mathbf{V}_1 \mathbf{U}_{11}$;

2) 对 \mathbf{V}_1 作 $m-1$ 步 WBArnoldi 过程, 得 $\mathbf{\Omega}_m, \mathbf{\Phi}_m, \mathbf{\Pi}_m$, 并在过程中同时计算: $\mathbf{S}_i = \mathbf{V}_i^T \mathbf{D} \mathbf{R}_{i-1}$, 同时更新: $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_{i-1} - \mathbf{V}_i \mathbf{S}_i$ 和 $\|\mathbf{R}_i\|_F$, 若 $\|\mathbf{R}_i\|_F \leq t_{\text{tol}}$, 则直接转第 3 步, $i=1, \dots, m$;

3) 设 i 是第 2 步跳出时的迭代步, 求解 $\mathbf{Y}_i = \mathbf{\Pi}_i^{-1} \mathbf{\Psi}_i$, 更新 $\mathbf{X}_i = \mathbf{X}_0 + \mathbf{\Phi}_i \mathbf{Y}_i$, 若 $\|\mathbf{R}_i\|_F \leq t_{\text{tol}}$ 则停机, 否则令 $\mathbf{X}_0 = \mathbf{X}_i$, 并转至第 1 步。

注 3 事实上, 若令 $\bar{\mathbf{\Phi}}_m = \sqrt{\mathbf{D}} \mathbf{\Phi}_m$, $\bar{\mathbf{\Omega}}_m = \sqrt{\mathbf{D}} \mathbf{\Omega}_m$, 则关系式 $\mathbf{A}\mathbf{\Omega}_m = \mathbf{\Phi}_m \mathbf{\Pi}_m$ 可写成 $\bar{\mathbf{A}} \bar{\mathbf{\Omega}}_m = \bar{\mathbf{\Phi}}_m \mathbf{\Pi}_m$, 其中 $\bar{\mathbf{A}} = \sqrt{\mathbf{D}} \mathbf{A} (\sqrt{\mathbf{D}})^{-1}$, $\bar{\mathbf{\Phi}}_m^T \bar{\mathbf{\Phi}}_m = \mathbf{I}$ 。因此 WBSGMRES 算法可以看成对 \mathbf{A} 作预处理, 将 \mathbf{A} 转化成 $\bar{\mathbf{A}}$, 再对 $\bar{\mathbf{A}}$ 作 BSGMRES 算法, 从而有利于增强收敛效果。

2 数值稳定性分析

虽然 SGMRES 算法比 GMRES 算法节约计算量, 但是由于求解子空间的基底不是一组列正交规范基, 故一般数值稳定性稍差。同样地, 本文新算法所选取的基底也不是列正交规范基, 因此本节将讨论新算法的基底条件数, 并说明若重新开始步数 m 不太大, 新算法的基底条件数可控制在一个不大的范围内。

引理 1 假设 $\mathbf{M} = [\mathbf{G}, \mathbf{E}_2, \dots, \mathbf{E}_m]$, 其中 $\mathbf{G} = [\mathbf{G}_1^T, \dots, \mathbf{G}_m^T]^T$, $\mathbf{G}_i \in \mathbf{R}^{p \times p}$, 且 \mathbf{G}_1 可逆, 则 $\kappa_2(\mathbf{M}) \leq \sqrt{1 + \|\mathbf{G}\|_2^2} \cdot \sqrt{1 + \|\mathbf{G}\|_2^2 \|\mathbf{G}_1^{-1}\|_2^2 a^2}$, 其中 $a = \max\{\|\mathbf{G}_1^{-1}\|_2, 1\}$ 。

证明 设 $L = [L_1^T, \dots, L_m^T]^T$ 是一个单位向量, 其中 $L_i \in \mathbb{R}^p$. 令 $\bar{L} = (1 - \|L_1\|_2^2)^{-\frac{1}{2}} [0, L_2^T, \dots, L_m^T]^T$, 则 $\|\bar{L}\|_2 = 1$. 因为 $2\|L_1\|_2 \|G\|_2 (1 - \|L_1\|_2^2)^{\frac{1}{2}} \leq \|L_1\|_2^2 + (1 - \|L_1\|_2^2) \|G\|_2^2$, 故:

$$\|ML\|_2 = \|GL_1 + (1 - \|L_1\|_2^2)^{\frac{1}{2}} \bar{L}\|_2 \leq \|G\|_2 \|L_1\|_2 + (1 - \|L_1\|_2^2)^{\frac{1}{2}} \leq \sqrt{1 + \|G\|_2^2},$$

从而 $\|M\|_2 \leq \sqrt{1 + \|G\|_2^2}$. 易知, $M^{-1} = [\bar{G}, E_2, \dots, E_m]$, 其中 $\bar{G} = [I, -G_2^T, \dots, -G_m^T]^T \cdot G_1^{-1}$, 故同理可得: $\|M^{-1}\|_2 \leq \sqrt{1 + \|\bar{G}\|_2^2}$.

因为 $\bar{G} = \begin{bmatrix} G_1^{-1} & & & \\ & -I_p & & \\ & & \ddots & \\ & & & -I_p \end{bmatrix} \cdot G \cdot G_1^{-1}$, 所以 $\|\bar{G}\|_2 \leq \|G\|_2 \cdot \|G_1^{-1}\|_2 \cdot \max\{\|G_1^{-1}\|_2, 1\}$. 因此

$$\kappa_2(M) = \|M\|_2 \cdot \|M^{-1}\|_2 \leq \sqrt{1 + \|G\|_2^2} \cdot \sqrt{1 + \|\bar{G}\|_2^2} \cdot \|G_1^{-1}\|_2^2 a^2, \text{ 其中 } a = \max\{\|G_1^{-1}\|_2, 1\}. \quad \text{证毕}$$

定理 1 设 $\Omega_m = [\tilde{R}_0, V_1, \dots, V_{m-1}]$, 且 $\|R_{m-1}\|_D \leq \|R_0\|_D$, 则 $\kappa_D(\Omega_m) \leq 2\kappa_D^2(R_{m-1}) \frac{\|R_0\|_D^2}{\|R_{m-1}\|_D^2}$.

证明 由 $R_0 = \tilde{R}_0 W_0$ 和(5)式知:

$$\tilde{R}_0 = R_0 W_0^{-1} = R_{m-1} W_0^{-1} + \sum_{i=1}^{m-1} V_i S_i W_0^{-1}. \quad (6)$$

设 WQR 分解 $R_{m-1} = \tilde{R}_{m-1} W_{m-1}$, 则 W_{m-1} 可逆. 令 $N_m = [\tilde{R}_{m-1}, V_1, \dots, V_{m-1}]$, 又 $\tilde{R}_{m-1} \perp_D \text{span}\{\Phi_{m-1}\}$, 则 $N_m^T D N_m = I$, 且 $\Omega_m = N_m M_m$, 其中 $M_m = [G, E_2, \dots, E_m]$, 这里 $G = [W_{m-1}^T, S_1^T, \dots, S_{m-1}^T]^T W_0^{-1}$, $G_1 = W_{m-1} W_0^{-1}$. 故有:

$$\kappa_D(\Omega_m) = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(\Omega_m^T D \Omega_m)}{\lambda_{\min}(\Omega_m^T D \Omega_m)}} = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(M_m^T M_m)}{\lambda_{\min}(M_m^T M_m)}} = \|M_m\|_2 \|M_m^{-1}\|_2 = \kappa_2(M_m).$$

一方面, 因为(6)式可写成: $\tilde{R}_0 = N_m G$, 故 $\|G\|_2 = \|N_m G\|_D = \|\tilde{R}_0\|_D = 1$; 另一方面, 因为 $\|R_{m-1}\|_D \leq \|R_0\|_D$, 即: $\|W_{m-1}\|_2 \leq \|W_0\|_2$, 故 $\frac{\|W_0\|_2}{\|W_{m-1}\|_2} \geq 1$, 又 $\|G_1^{-1}\|_2 = \|W_0 W_{m-1}^{-1}\|_2 \leq \|W_0\|_2 \|W_{m-1}^{-1}\|_2 = \|W_0\|_2 \frac{\kappa_2(W_{m-1})}{\|W_{m-1}\|_2}$, 所以 $a = \max\{\|G_1^{-1}\|_2, 1\} \leq \kappa_2(W_{m-1}) \frac{\|W_0\|_2}{\|W_{m-1}\|_2}$. 因此由引理 1 得:

$$\kappa_2(M_m) \leq \sqrt{2} \sqrt{1 + \kappa_2^4(W_{m-1})} \frac{\|W_0\|_2^4}{\|W_{m-1}\|_2^4} \leq 2\kappa_2^2(W_{m-1}) \frac{\|W_0\|_2^2}{\|W_{m-1}\|_2^2} = 2\kappa_D^2(R_{m-1}) \frac{\|R_0\|_D^2}{\|R_{m-1}\|_D^2}. \quad \text{证毕}$$

推论 1 若 $\bar{\Omega}_m = [R_0, V_1, \dots, V_{m-1}]$, 且 $\|R_{m-1}\|_D \leq \|R_0\|_D$, 则有:

$$\kappa_D(\bar{\Omega}_m) = \begin{cases} \kappa_D^2(R_{m-1}) \frac{1 + \|R_0\|_D^2}{\|R_{m-1}\|_D^2}, & \text{若 } 0 < \|R_{m-1}\|_D < \kappa_D^2(R_{m-1}), \\ \sqrt{2} \kappa_D^2(R_{m-1}) \frac{\|R_0\|_D \sqrt{1 + \|R_0\|_D^2}}{\|R_{m-1}\|_D}, & \text{若 } \|R_{m-1}\|_D \geq \kappa_D^2(R_{m-1}). \end{cases}$$

证明 类似于定理 1 的证明, 可知此时 $\bar{\Omega}_m = N_m \bar{M}_m$, 其中 $\bar{M}_m = [G, E_2, \dots, E_m]$, 这里 $G = [W_{m-1}^T, S_1^T, \dots, S_{m-1}^T]^T$, $G_1 = W_{m-1}$. 因为 $N_m^T D N_m = I$, 故仍有 $\kappa_D(\bar{\Omega}_m) = \kappa_2(\bar{M}_m)$. 由于此时 $R_0 = N_m G$, 所以 $\|G\|_2 = \|N_m G\|_D = \|R_0\|_D$. 又 $\|G_1^{-1}\|_2 = \|W_{m-1}^{-1}\|_2 = \frac{\kappa_2(W_{m-1})}{\|W_{m-1}\|_2} = \frac{\kappa_D(R_{m-1})}{\|R_{m-1}\|_D}$, 当 $0 < \|R_{m-1}\|_D < \kappa_D(R_{m-1})$, 即引理 1 中 $a = \|G_1^{-1}\|_2 = \frac{\kappa_D(R_{m-1})}{\|R_{m-1}\|_D}$ 时, 由引理 1 可得:

$$\kappa_2(\bar{M}_m) \leq \sqrt{1 + \|R_0\|_D^2} \sqrt{1 + \kappa_D^4(R_{m-1})} \frac{\|R_0\|_D^2}{\|R_{m-1}\|_D^4} \leq \kappa_D^2(R_{m-1}) \frac{1 + \|R_0\|_D^2}{\|R_{m-1}\|_D^2}.$$

当 $\|R_{m-1}\|_D \geq \kappa_D(R_{m-1})$, 即 $a=1$ 时, 则有:

$$\kappa_2(\bar{M}_m) \leq \sqrt{1 + \|R_0\|_D^2} \sqrt{1 + \kappa_D^2(R_{m-1})} \frac{\|R_0\|_D^2}{\|R_{m-1}\|_D^2} \leq \sqrt{2} \kappa_D(R_{m-1}) \frac{\|R_0\|_D \sqrt{1 + \|R_0\|_D^2}}{\|R_{m-1}\|_D}. \quad \text{证毕}$$

注 4 从定理 1 和推论 1 可见, 在新算法中, 若不对初始块残量 R_0 作单位化, 则在迭代的初期, $\|R_{m-1}\|_D$ 不

太小时, $\kappa_D(\bar{\Omega}_m)$ 与 $\kappa_D(\Omega_m)$ 的上界相差不大。但是随着迭代步数的增加, $\|\mathbf{R}_{m-1}\|_D$ 越来越小, $\kappa_D^2(\mathbf{R}_{m-1}) \cdot \frac{1 + \|\mathbf{R}_0\|_D^2}{\|\mathbf{R}_{m-1}\|_D^2}$ 可能比 $2\kappa_D^2(\mathbf{R}_{m-1}) \frac{\|\mathbf{R}_0\|_D^2}{\|\mathbf{R}_{m-1}\|_D^2}$ 大非常多, 从而 $\kappa_D(\bar{\Omega}_m)$ 相比 $\kappa_D(\Omega_m)$ 来说可能会越来越大, 不利于方程组的求解。因此必须对初始块残量 \mathbf{R}_0 作单位化。

受文献[9]中定理 1 的启发, 下面的性质 1 将给出新算法的一个不变性质: 加权矩阵 \mathbf{D} 乘上一个正实数后并不改变新算法的解和收敛效果。

性质 1 若 \mathbf{D} 被换作 $\hat{\mathbf{D}} = \alpha\mathbf{D}$, ($0 < \alpha \in \mathbf{R}$), 则 WBSGMRES 算法的解不变。

证明 从算法 1 中可知: $\hat{\mathbf{r}}_k = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\tilde{\mathbf{r}}_k$, $\hat{\omega}_{jk} = \sqrt{\alpha}\omega_{jk}$, 故初始块残量 \mathbf{R}_0 经过 WQR 分解后有: $\hat{\mathbf{R}}_0 = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\tilde{\mathbf{R}}_0$ 。进而

$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{R}}_0$ 经过 WQR 分解后有: $\hat{\mathbf{V}}_1 = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\mathbf{V}_1$, $\hat{\mathbf{U}}_{11} = \mathbf{U}_{11}$ 。

在对 $\hat{\mathbf{V}}_1$ 作 $m-1$ 次 WBArnoldi 过程中, 根据算法 2 不难计算:

$$\hat{\mathbf{V}}_k = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\mathbf{V}_k, \hat{\mathbf{V}} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\mathbf{V},$$

$$\hat{\mathbf{U}}_{jk} = (\hat{\mathbf{V}}, \hat{\mathbf{V}}_j)_{\hat{\mathbf{D}}} = \frac{1}{\alpha}(\mathbf{V}, \mathbf{V}_j)_{\hat{\mathbf{D}}} = (\mathbf{V}, \mathbf{V}_j)_D = \mathbf{U}_{jk},$$

故 $\hat{\Phi}_m = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\Phi_m$, $\hat{\Pi}_m = \Pi_m$, $\hat{\Omega}_m = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\Omega_m$ 。因此, 若令 $\hat{\mathbf{X}}_m = \mathbf{X}_0 + \hat{\Omega}_m \hat{\mathbf{Y}}_m$, 则有:

$$\hat{\mathbf{R}}_m = \mathbf{b} - \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{X}}_m = \mathbf{R}_0 - \hat{\Phi}_m \hat{\Phi}_m^T \hat{\mathbf{D}}\mathbf{R}_0 = \mathbf{R}_0 - \Phi_m \Phi_m^T \mathbf{D}\mathbf{R}_0 = \mathbf{R}_m,$$

且 $\hat{\mathbf{S}}_i = \hat{\Phi}_m^T \hat{\mathbf{D}}\mathbf{R}_0 = \sqrt{\alpha}\mathbf{S}_i$, $\hat{\mathbf{Y}}_m = \hat{\Pi}_m^{-1}[\hat{\mathbf{S}}_1^T, \dots, \hat{\mathbf{S}}_m^T]^T = \sqrt{\alpha}\Pi_m^{-1}[\mathbf{S}_1^T, \dots, \mathbf{S}_m^T]^T = \sqrt{\alpha}\mathbf{Y}_m$, 从而

$$\hat{\mathbf{X}}_m = \mathbf{X}_0 + \hat{\Omega}_m \hat{\mathbf{Y}}_m = \mathbf{X}_0 + \Omega_m \mathbf{Y}_m = \mathbf{X}_m.$$

证毕

3 数值实验

本节将通过 3 个实例来说明新算法的优势。所有算例都使用 Matlab R2014a, 计算机处理器型号为 Inter (R) Core(TM) i5-6200U CPU@2.30 GHz, 64 位操作系统, 内存 8GB。下面的算例中重新开始步数都取 $m=20$, 初始块向量 $\mathbf{X}_0 = \text{zeros}(n, p)$, 右端项 $\mathbf{B} = \text{rand}(n, p)$, 其中 n 为矩阵维数, p 为块大小, 取 $p=3$ 。算例中主要比较了算法求解过程中所耗的 cpu 时间 (t_{cpu} , 单位: s)、矩阵向量乘积 mvp (单位: 次) 和残量误差 $\text{error}(\sigma_{\text{error}} = \|\mathbf{B} - \mathbf{A}\mathbf{X}_m\|_F)$ 。加权矩阵取 $\mathbf{D} = \text{diag}\{d_1, d_2, \dots, d_n\}$, 其中:

$$d_i = \sqrt{n} \frac{\sum_{j=1}^p |\mathbf{B}(i, j)|}{\|\mathbf{B}\|_F}, i = 1, \dots, n.$$

例 1 本例中测试的矩阵是 sherman4, 来自矩阵市场, 主要应用于计算流体动力学中, 阶数为 1 104, 有 3 786 个非零元, 条件数为 $7.16\text{E}+03$ 。为了说明新算法的初始块残量必须单位化, 本例比较了两种算法。一个是初始块残量作了单位化的加权块 simpler GMRES 算法 (WBSGMRES), 记为 Alg-3.1; 一个是初始块残量未作单位化的 WBSGMRES 算法, 记为 Alg-3.2, 停机准则设为 $\frac{\|\mathbf{R}_m\|_F}{\|\mathbf{B}\|_F} \leq t_{\text{tol}}$, 误差容忍度 $t_{\text{tol}} = 10^{-10}$, 算例结果见图 1。

从图 1 可见, 初始块残量作了单位化的 Alg-3.1, 在矩阵向量积个数达到 2 300 次左右就收敛了, 而初始块残量未作单位化的 Alg-3.2, 在矩阵向量积个数达到 1 200 次左右, 残量误差就一直停滞在 10^{-5} , 不再下降收敛了。出现这种现象的主要原因就是 Alg-3.2 的基底 Ω_m 的 \mathbf{D} -条件数非常病态, 甚

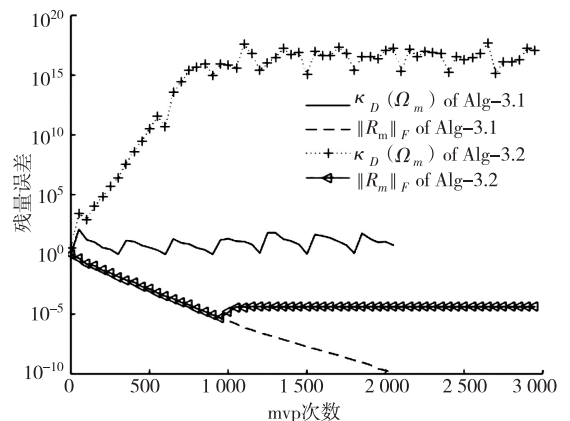


图 1 初始块残量单位化对算法 3 的数值稳定性影响
Fig. 1 The effect of initial block residual unitization on the numerical stability of algorithm 3

至达到了 10^{15} , 而 Alg-3.2 的基底 Ω_m 很稳定, 其 D -条件数始终在 1 附近, 这与本文定理 1 和推论 1 的结论相吻合, 即: 新算法的初始块残量必须作单位化。

例 2 本例主要比较了块 GMRES 算法(BGMRES), 块 simpler GMRES 算法(BSGMRES)和加权块 simpler GMRES 算法(WBSGMRES), 停机准则设为 $\frac{\|R_m\|_F}{\|B\|_F} \leq t_{\text{tol}} = 10^{-6}$ 。测试矩阵分别为 add20, bfw782a, memplus 和 young1c 这 4 个矩阵, 都来自矩阵市场, 矩阵的详细信息和算法的结果分别见表 1 和表 2。 t_{cpu} 表示花费的 cpu 时间, m_{mvp} 表示运行需要的矩阵向量积个数, σ_{error} 表示残量误差。本例中加权矩阵取 $D = \text{diag}\{d_1, d_2, \dots, d_n\}$, 其中:

$$d_i = \sqrt{n} \frac{\sum_{j=1}^p |R_m(i, j)|}{\|R_m\|_F}, i = 1, \dots, n.$$

表 1 例 2 中所有测试矩阵的信息

Tab. 1 Information of all the test matrices in example 2

序号	矩阵名称	实复数	大小	非零元个数	条件数	应用领域
1	add20	实数	2 395	17 319	1.76E+04	半导体系统设计技术
2	bfw782a	实数	782	7 516	4.60E+03	电磁学
3	memplus	实数	17 758	126 150	2.67E+05	电路仿真
4	young1c	复数	841	4 089	1.01E+03	结构动力学

从表 2 中可见, 前 3 个矩阵, DBSGMRES 算法用的矩阵向量积个数最少, 消耗的时间也是最少, 因此比 BGMRES 算法和 BSGMRES 算法收敛效果好。但是对矩阵 young1c, 虽然 DBSGMRES 算法的矩阵向量积个数最少, 但是时间却比 BGMRES 算法和 BSGMRES 算法多一些, 这是因为加权算法中 D -内积的计算量要比欧氏内积大, 该问题可通过选取更合适的加权矩阵 D 来解决, 这将是下一步的主要研究工作。

例 3 为了说明加权矩阵乘上一个正实数后对新算法的结果没有影响, 本例比较了加入新的加权矩阵 D_2 的 WBSGMRES 算法和原加权矩阵不变的 WBSGMRES 算法, 图 2 是两个算法的数值结果, 其中:

$$D_2 = \frac{1}{\sqrt{n}} D.$$

表 2 4 个矩阵在 BGMRES, BSGMRES 和 DBSGMRES 算法下的结果比较

Tab. 2 Comparison of the results from BGMRES, BSGMRES and DBSGMRES

矩阵	比较项目	BGMRES	BSGMRES	DBSGMRES
add20	t_{cpu}	2.389	2.120	1.481*
	m_{mvp}	3 501	3 501	1 890
	σ_{error}	4.538 9E-05	4.538 9E-05	4.652 0E-05
bfw782a	t_{cpu}	3.655	3.115	1.440*
	m_{mvp}	10 806	10 512	3 912
	σ_{error}	2.805 5E-05	2.810 8E-05	2.461 5E-05
memplus	t_{cpu}	97.836	87.555	36.028*
	m_{mvp}	20 205	20 556	6 654
	σ_{error}	1.332 9E-04	1.332 2E-04	1.323 3E-04
young1c	t_{cpu}	9.062	8.116*	9.593
	m_{mvp}	12 774	12 912	10 770
	σ_{error}	2.902 0E-05	2.904 9E-05	2.891 6E-05

注: * 表示花费最少的时间

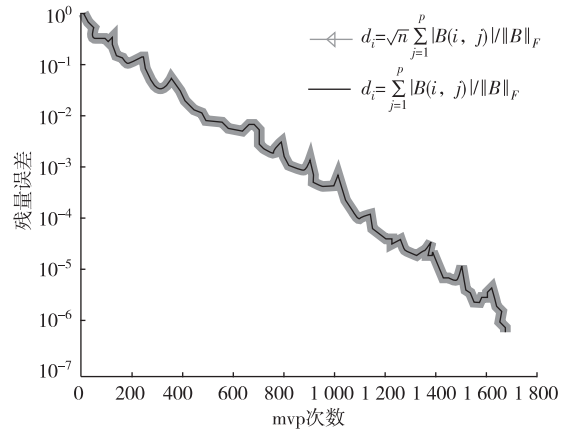


图 2 加权矩阵乘上一个正实数后的两个算法比较
Fig. 2 Comparison of two algorithms after the positive real multiple of the weighted matrix

从图 2 可见, 加权矩阵系数变动后的 WBSGMRES 算法的收敛曲线与变动前的相重合, 这说明加权矩阵乘上一个正实数后不改变新算法的解和收敛效果, 和性质 1 的结论相吻合。

参考文献:

[1] 祖佳琪, 刘巧华. 简化块 GMRES 的稳定算法[J]. 应用数学与计算数学学报, 2016, 30(1): 51-59.

ZU J Q, LIU Q H. Simpler block GMRES stabilization algorithm[J]. Journal of Applied Mathematics and Computa-

- tional Mathematics, 2016, 30(1): 51-59.
- [2] CHATFIELD D C, REEVES M S, TRUHLAR D G, et al. Complex generalized minimal residual algorithm for iterative solution of quantum mechanical reactive scattering equations[J]. Journal of Chemical Physics, 1992, 97(11): 8322-8333.
- [3] GU X M, HUANG T Z, CARPENTIERI B. BiCGCR2: A new extension of conjugate residual method for solving non-Hermitian linear systems[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2016, 305: 115-128.
- [4] SAAD Y, SCHULTZ M H. GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems [J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1986, 7(3): 856-869.
- [5] WALKER H F, ZHOU L. A Simpler GMRES[J]. Numerical Linear Algorithm and Applications, 1994, 1(6): 571-581.
- [6] 杨圣炜. 一种加权的 Simpler GMRES 算法[D]. 厦门: 厦门大学, 2008.
YANG S W. A weighted Simpler GMRES algorithm[D]. Xiamen: Xiamen University, 2008.
- [7] SIMONCINI V, GALLOPOULOUS E. A hybrid block GMRES method for nonsymmetric systems with multiple right-hand sides[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 1996, 66(1/2): 457-469.
- [8] LIU H L, ZHONG B J. Simpler block GMRES for nonsymmetric systems with multiple right-hand sides[J]. Electronic Transactions on Numerical Analysis, 2008, 30: 1-9.
- [9] CAO Z H, YU X Y. A note on weighted FOM and GMRES for solving nonsymmetric linear systems[J]. Applied Mathematics and Computation, 2004, 151(3): 719-727.

A Weighted Block Simpler GMRES Algorithm and Its Applications

ZHONG Hongxiu, WU Xinbin

(School of Science, Jiangnan University, Wuxi Jiangsu 214122, China)

Abstract: [Purposes] To solve the linear equations of asymmetric multiple right-end terms more quickly and stably. [Methods] Effective weighted strategy and the analysis for the basis condition number are used to improve the block simpler GMRES method. [Findings] The weighted block simpler GMRES algorithm is proposed, and the numerical stability analysis of the algorithm is carried out. It is concluded that the unitization of the initial block residual is the key to the numerical stability of the new algorithm. And there also gets an invariant property of the weighted matrix. [Conclusions] Numerical examples show that the new algorithm has good stability and can solve the target equations faster.

Keywords: linear systems; block simpler GMRES method; weighted strategy

(责任编辑 许 甲)