第31卷 第5期 工 程 数 学 学 报 Vol. 31 No. 5
2014年10月 CHINESE JOURNAL OF ENGINEERING MATHEMATICS Oct. 2014

doi: 10.3969/j.issn.1005-3085.2014.05.007 **文章编号**: 1005-3085(2014)05-0697-10

基于加权 GMRES 的多项式预处理广义极小残差法*

关朋燕[1]， 李春光[2,†]， 景何仿[2]

(1- 北方民族大学信息与计算科学学院，银川 750021;

2- 北方民族大学数值计算与工程应用研究所，银川 750021)

摘 要: Essai 对求解非对称线性方程组的广义极小残差法 (GMRES) 进行改进，提出加权 GMRES 方法 (WGMRES)．该方法具有良好的收敛效果，但计算量较大．本文利用加权 GMRES 本身构造出一种有效的多项式预处理并与加权 GMRES 结合，构造了一种新算法．该算法能够显著地减少加权 GMRES 迭代次数，并能减少运算量和储存量．数值算例表明，相对于加权 GMRES 方法来说，新算法减少了运算时间和迭代次数．

关键词: 多项式预处理；加权 Arnoldi 算法；加权 GMRES 算法；迭代法；平行板突扩管

分类号: **AMS**(2000) 65F10; 65F50 **中图分类号**: O241.6 **文献标识码**: A

1 引言

许多科学计算问题经过离散可归结为解线性方程组

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

其中 $A \in C^{N\times N}$ 非奇异，b 是列向量．解这类方程组的一类方法就是基于最小残差法

$$x_n = x_0 + q_{n-1}(A)r_0, \tag{2}$$

其中 $q_{n-1}(x)$ 为多项式且 $\deg q_{n-1} \le n-1$，使得 $\|r_n\|$ 最小，或

$$x_n \in x_0 + K_n(r_0, A), \quad Ar_n \perp K_n(r_0, A),$$

$r_n = b - Ax_n$ 表示残差，$K_n(r_0, A) = \mathrm{span}\,\{r_0, Ar_0, \cdots, A^{n-1}r_0\}$ 是 Krylov 子空间．

令 $p_n = b - zq_{n-1}(z)$，此为残差多项式，于是 $r_n = p_n(A)r_0$．在这类方法中应用最广的是 GMRES 方法[1]，GMRES 是在 Krylov 子空间上进行迭代，该算法的收敛性由残差模的单调性得出，而且具有良好的数值稳定性，但具有较长的迭代公式，因此每步迭代的计算量与储存量都线性增长，同时难以有效的并行运算．Saad 采用循环 GMRES 法，但 GMRES (m)[2] 会失去超线性收敛，产生停滞．1998 年，Essai 对 GMRES 方法进行

收稿日期: 2012-12-31. **作者简介**: 关朋燕 (1985年5月生)，女，硕士. 研究方向：数值代数.

*基金项目: 国家自然科学基金 (91230111).

†通讯作者: 李春光 E-mail: cglizd@hotmail.com

改进，提出加权GMRES方法[3]，其优点在于具有良好的收敛性，但也增加了计算量．Nachtigal等[4–11]讨论了GMRES和其他方法相结合策略．文献[12–17]是将加权思想与其他方法相结合文章．本文采用多项式预处理加权GMRES(m)法及多项式预处理加权GMRES(m)法．其主要问题是找到有效的低阶多项式$p_n(x)$，迭代解应用到$p_n(A)Ax=p_n(A)b$中，这会产生一个Krylov子空间

$$K^m\big(p_n(A)A;r_0\big)=\operatorname{span}\big\{r_0,\,p_n(A)Ar_0,\cdots,(p_n(A)A)^{m-1}r_0\big\}.$$

它是Krylov子空间$K^{(n+1)(m-1)+1}(A;r_0)$的子空间．本文直接利用加权GMRES方法本身来构造预处理多项式，多项式的预处理和混合迭代[4]极为相似，其思想就是尽可能减少迭代次数．随着迭代次数的减少，存储量和运算量也会相应减少．

2 加权Arnoldi算法

先来定义D-内积及D-范数．如果$D=\operatorname{diag}\{d_1,d_2,\cdots,d_n\}$ $(d_i>0,\ i=1,2,\cdots,n)$是一个对角矩阵，$u,\,v\in R^n$是两个向量，那么它们的D-内积就定义为

$$(u,v)_D=v^TDu=\sum_{i=0}^{N}d_iu_iv_i.$$

显然，当$d_1=d_2=\cdots=d_n=1$时，$(u,v)_D=(u,v)$．如果$(u,v)_D=0$，就称u和v关于D相互正交，也可以表示为$u\bot_Dv$．

同样可以定义D-范数

$$\|u\|_D=\sqrt{(u,u)_D}=\sqrt{u^TDu}=\sqrt{\sum_{i=0}^{N}d_iu_i^2},\quad\forall\,u\in R^n.$$

求解方程组(1)的加权Arnoldi算法[2]：

步骤1 构造v_1，进行第2至第6步，对于$j=1,2,\cdots,k$；

步骤2 计算$w=Av_j$；

步骤3 计算$h_{ij}=(w,v_i)_D,\ w=w-h_{ij}v_i,\ i=1,2,\cdots,j$；

步骤4 计算$h_{j+1,j}=\|w\|_D$；

步骤5 如果$h_{j+1,j}=0$，则停止；

步骤6 计算$v_{j+1}=w/h_{j+1,j}$；

步骤7 结束．

3 预处理多项式的构造

加权GMRES方法的主要思想是Krylov子空间$K^n(r_0,A)$找到一个向量z_n，使其D-范数极小化

$$\min_{z_n\in K^n(r_0,A)}\big\|b-A(x_0+z_n)\big\|_D=\min_{z_n\in K^n(r_0,A)}\big\|r_0-Az_n\big\|_D,$$

$z_n \in K^n(r_0, A)$ 可写作 $z_n = V_n y_n$，其中 $V_n = (v_1, v_2, \cdots, v_n)$，使得 $V_n^T D V_n$ 是加权 Arnoldi D 正交过程形成的 Krylov 子空间的一组向量．所以有

$$\begin{aligned}\min_{z_n \in K^n(r_0,A)} \left\|b - A(x_0 + z_n)\right\|_D &= \min_{z_n \in K^n(r_0,A)} \left\|r_0 - AV_n y_n\right\|_D \\ &= \min_{z_n \in K^n(r_0,A)} \left\|V_n\left(\|r_0\| e_1 - \overline{H_n} y_n\right)\right\|_D \\ &= \min_{z_n \in K^n(r_0,A)} \left\|\|r_0\| e_1 - \overline{H_n} y_n\right\|,\end{aligned}$$

其中

$$H_n = V_n^T DAV_n, \quad \overline{H_n} = \begin{bmatrix} H_n \\ h_{n+1,n} e_n^T \end{bmatrix}.$$

现在利用残差多项式来构造出多项式预处理因子，K_n 表示 $N \times n$ 矩阵，其列为 Krylov 子空间 $K_n = \operatorname{span}\{r_0, Ar_0, \cdots, A^{n-1} r_0\}$ 的基向量．由加权 GMRES 方法，有以下迭代公式

$$v_{j+1} = h_{j+1,n}^{-1}(Av_j - V_j h_j), \quad h_j = (h_{1j}, h_{2j}, \cdots, h_{jj}), \quad j = 1, 2, \cdots, n. \tag{3}$$

因为 V_n 的列和 K_n 的列张成的是同一个空间，我们有

$$V_n = K_n C_n, \tag{4}$$

其中 C_n 为上三角矩阵

$$C_n = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{{\Large 0}} & & & c_{nn} \end{bmatrix}, \tag{5}$$

由 (4) 式表示出向量 v_j 和 v_{j+1}，并代入 (3) 式，比较两边关于 $A^j v_0$ 的系数，可得到

$$\begin{bmatrix} c_{1,j+1} \\ \cdots \\ c_{j+1,j+1} \end{bmatrix} = \left[\begin{bmatrix} 0 \\ c_{1j} \\ \cdots \\ c_{jj} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} C_j h_j \\ 0 \end{bmatrix} \right] \Big/ h_{j+1,j}. \tag{6}$$

再用加权 GMRES 方法解 Hessenberg 矩阵最小二乘问题，得 $x_n = x_0 + V_n y$.

因为 $V_n y = K_n C_n y$，可得出向量 $C_n y$ 为多项式 $q_{n-1}(z)$ 的系数

$$C_n y = (a_0, \cdots, a_{n-1})^T, \quad q_{n-1}(z) = a_0 + a_1 z + \cdots + a_n z^{n-1}, \tag{7}$$

$p_n(z)=1-zq_{n-1}(z)$ 即为残差多项式．可得

$$q_{n-1}(z)=\frac{1-p_n(z)}{z}.$$

令 $k=n-1$，由此式可得 $q_k(A)\approx A^{-1}$，可参见文献 [17]，所以可用 $q_k(A)$ 作预处理矩阵．

4 多项式预处理加权 GMRES (m) 算法

根据上面的分析，给出以下多项式加权 GMRES (m) 算法，简记为 PWGMRES (m) 算法：

1) 输入：近似解精度 ε，Krylov 子空间的维数 m，所需计算的预处理多项式 $q_{n-1}(z)$ 的次数 k，初始值 x_0；

2) 计算 $r_0=b-Ax_0$；

3) 选择向量 d，使得 $\|d\|_2=\sqrt{n}$, $\beta=\|d\|_D$, $v_1=r_0/\beta$；

4) 利用加权 Arnoldi 过程计算 H_k, V_k；

5) 对于 $j=1,2,\cdots,k$；

6) 根据 (6) 式计算 c_{j+1}；

7) 计算

$$C_{j+1}=\left[\begin{bmatrix} C_j & O \\ O & 0 \end{bmatrix}+\begin{bmatrix} O & c_{j+1}\end{bmatrix}\right]\Big/h_{j+1,j};$$

8) 结束 j 循环；

9) 由 QR 分解计算最小二乘问题 $\min\limits_{y}\|\beta e_1-\overline{H_m}y\|_2$，得到的解为 y_m，并令 $x_k=x_0+V_ky$；

10) 计算预处理多项式 $q_k(z)$；

11) 对 $q_k(A)Ax=q_k(A)b$ 用加权 GMRES (m) 算法；

12) 结束．

5 数值算例

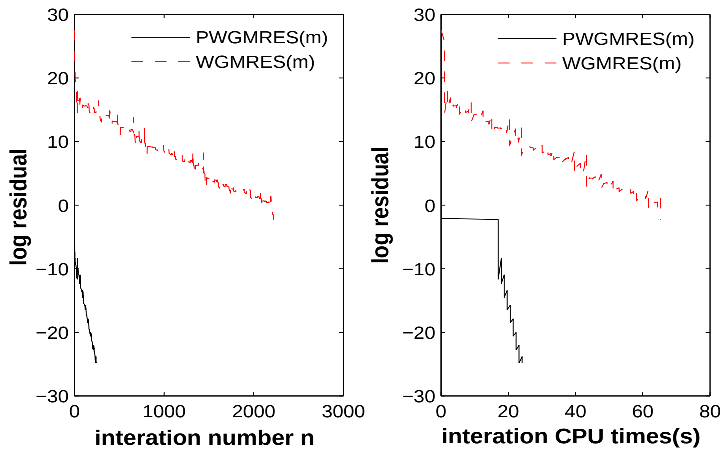
为了说明 PWGMRES (m) 算法的有效性，给出数值算例．关于加权 d_i 的选择，Essai 在文献 [3] 中 WGMRES 算法里建议取

$$d_i=\sqrt{n}\frac{|(r_0)_i|}{\|r_0\|_2},\quad D=\mathrm{diag}(d),$$

其中 r_0 的任意分量不能为零．选取向量 b 使得方程 $Ax=b$ 的精确解为 $x=(1,1,\cdots,1)^T$，其相关残差 $\frac{\|r_m\|}{\|r_0\|}\le\varepsilon$ 或残差 $\|r_m\|\le\eta$.

需要说明的是本文所有算法的程序是用 Matlab 在 4CPU, 3.20GHz，内存为 1.00GB 的电脑上编写的，且每个算例中 r_0 的任意分量不为零．

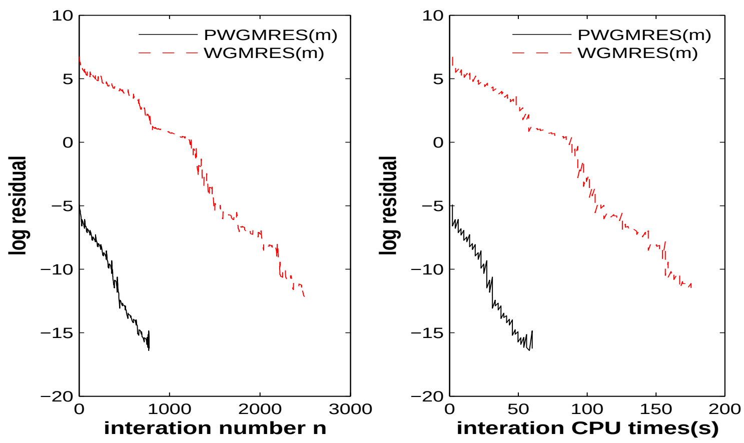
算例 1　本例中矩阵 $nos2\_sm$ 取自矩阵市场 (http://math.nist.gov/MatrixMarket/)，条件数为 $6.3\,\mathrm{E}+09$，非零元素个数为 2547，阶数为 957×957，$\varepsilon=10^{-15}$，$\eta\leq 10^{-8}$. 其 $k=10$，$m=30$ 预处理后的矩阵与没作预处理的矩阵的残差与迭代次数和残差与迭代时间的关系，如图 1 所示.



(a) 残差与迭代次数　　(b) 残差与迭代时间

图 1:　算例 1 中 PWGMRES(30) 和 WGMRES(30) 比较

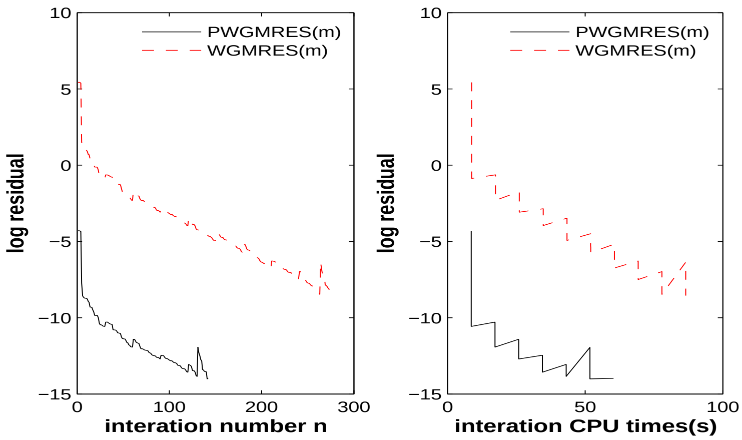
算例 2　本例中矩阵 $orsirr\_1\_sm$ 取自矩阵市场 (http://math.nist.gov/MatrixMarket/)，条件数为 $1\,\mathrm{E}+02$，非零元素个数为 6858，阶数为 1030×1030，$\varepsilon=10^{-8}$，$\eta\leq 10^{-7}$. 其 $k=2$，$m=40$ 预处理后的矩阵与没作预处理的矩阵的残差与迭代次数和残差与迭代时间的关系，如图 2 所示.



(a) 残差与迭代次数　　(b) 残差与迭代时间

图 2:　算例 2 中 PWGMRES(40) 和 WGMRES(40) 比较

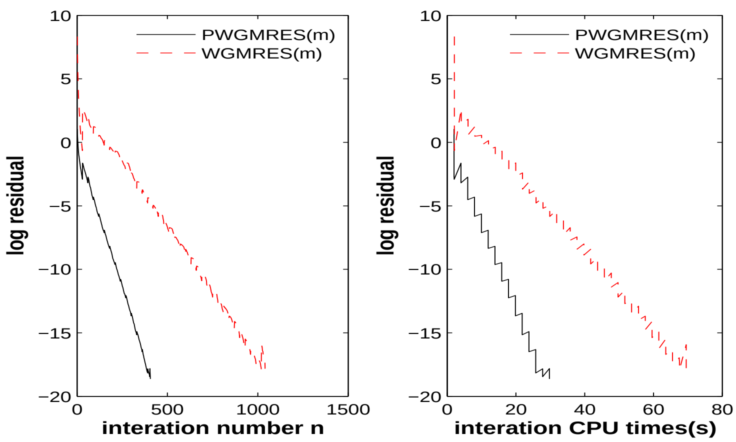
算例 3 本例中矩阵 $orsreg\_1\_sm$ 取自矩阵市场 (http://math.nist.gov/MatrixMarket/)，条件数为 1 E + 02，非零元素个数为 14133，阶数为 2205×2205，$\varepsilon = 10^{-6}$，$\eta \leq 10^{-6}$. 其 $k = 1$，$m = 30$ 预处理后的矩阵与没作预处理的矩阵的残差与迭代次数和残差与迭代时间的关系，如图 3 所示.



(a) 残差与迭代次数　　(b) 残差与迭代时间

图 3: 算例 3 中 PWGMRES(30) 和 WGMRES(30) 比较

算例 4 本例中矩阵为 $Grcar$，阶数为 1000×1000，$\varepsilon = 10^{-12}$，$\eta \leq 10^{-8}$. 其 $k = 10$，$m = 30$ 预处理后的矩阵与没作预处理的矩阵的残差与迭代次数和残差与迭代时间的关系，如图 4 所示.



(a) 残差与迭代次数　　(b) 残差与迭代时间

图 4: 算例 4 中 PWGMRES(30) 和 WGMRES(30) 比较

算例 5 平行板组成的突扩管道，如图 5 所示，流动为层流，进口为均匀流速，根据文献 [18] 中提出的圆图扩管内流动雷诺数的定义 $\mathrm{Re} = ud/v$，导出相应的进口速度 $u_{in} = \mathrm{Re} * v/d$，管道壁面为光滑的无滑移边界，密度保持恒定不变，为 $\rho = 1.0\,\mathrm{kg/m^3}$，进口宽度为 $2d = 2$，整个管道的宽为 $2D = 4$，其上下管道都足够长 (这里取 30)，出口边界采用充分发展条件，试确定管道中流体的速度分布与压力分布.

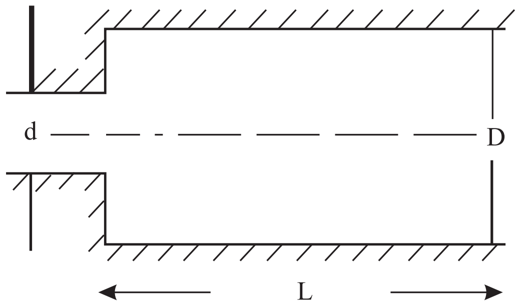
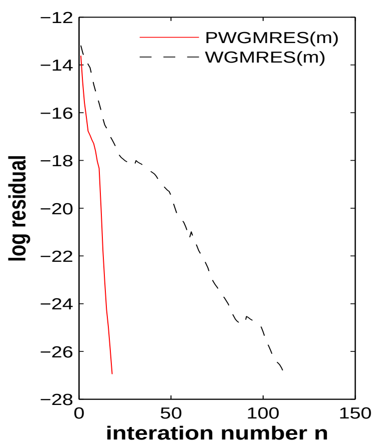


图 5: 算例 5 二维图扩管示意图

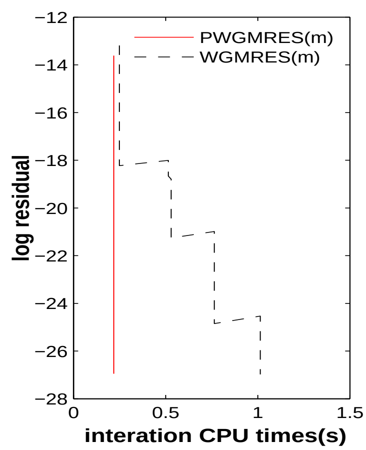
边界条件：

对称线上：$u = 0,\ \frac{\partial u}{\partial y} = 0$；入口处：$u, v$ 为给定值；固体边界线上：$u = v = 0$；雷诺数：$\mathrm{Re} = 200$.

将求解区域进行剖分，网格数为 15×10，方程离散后的系数矩阵呈五对角状，非零元素的个数为 1500，$\varepsilon = 10^{-6}$，$\eta \le 10^{-6}$. 其 $k = 5$，$m = 30$. 解得算例 5 预处理后的矩阵和没作预处理的矩阵，其最后一个压力残差与迭代次数和残差与迭代时间的关系，如图 6 所示.



(a) 残差与迭代次数



(b) 残差与迭代时间

图 6: 算例 5 中 PWGMRES(30) 和 WGMRES(30) 比较

为了说明计算的效率，表1给出上述五个算例所用的CPU时间及迭代的次数；表2给出了算例5所用外迭代次数与CPU时间.

表1: 所用的CPU时间及迭代次数

算例	算法	迭代次数	CPU(s)
算例1	PWGMRES (m)	340	16.7739
	WGMRES (m)	3121	77.4142
算例2	PWGMRES (m)	776	62.7500
	WGMRES (m)	2490	175.6090
算例3	PWGMRES (m)	142	71.8600
	WGMRES (m)	274	86.6250
算例4	PWGMRES (m)	406	61.4060
	SIMPLEC	1041	69.5150
算例5中最后一个压力矩阵	PWGMRES (m)	18	0.3590
	WGMRES (m)	112	1.5150

表2: 平行板突扩管网格数为 15×10 时算法的CPU比较

算法1	外迭代次数	CPU(s)
PWGMRES (m)	94	191.3807
WGMRES (m)	94	223.7347

从以上五个数值算例的迭代次数和迭代时间分别与残差的关系图及CPU时间表比较可看出，PWGMRES (m) 算法收敛所需要的迭代次数以及CPU时间均比WGMRES (m) 算法的少，从而说明了所构造的算法的有效性. 大量的例子表明：通常解大型稀疏对称矩阵或块三对角矩阵时，预处理多项式 $q_k(z)$ 次数 k 的选择可以随意选择，但当取 k 为5–15时收敛效果相对较好；解其它大型稀疏类型的矩阵时 k 值不宜过大，这样会增加计算预处理子的时间与运算量，有可能还会导致矩阵不收敛.

6 结论

本文我们利用多项式预处理技术对WGMRES (m) 进行改进，得到PWGMRES (m) 较之WGMRES (m) 有较好的收敛速度，同时也大大减少了运算量与运算时间，但如何选取预处理多项式 $q_k(z)$ 次数 k 与权值 d 使PWGMRES (m) 收敛速度达到最优，目前我们建议的值只是经验值.

参考文献：

[1] Saad Y, Schultz M H. GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems[J]. Computational and Applied Mathematics, 1986, 7(3): 856-869

[2] 蔡大用，白峰杉. 高等数值分析[M]. 北京：清华大学出版社，1997
Cai D Y, Bai F S. Advanced Numerical Analysis[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 1997

[3] Essai A. Weighted FOM and GMRES for solving nonsymmtric linear systems[J]. Numerical Algorithms, 1998, 89(3-4): 277-292

[4] Nachtigal N M, *et al.* A hybrid GMRES algorithm for nonsymmetric linear systems[J]. Society for Industrial and Applied Mathematics Journal on Matrix Analysis and Applications, 1992, 13(3): 765-825

[5] Saad Y. Least squares polynomials in the complex plane and their ues for solving any nonlinear systems[J]. Society for Industrial and Applied Mathematics Journal on Numerical Analysis, 1987, 24(1): 155-169

[6] An H B, Bai Z Z. NGLM: a globally convergent Newton-GMRES method[J]. Mathematica Numerica Sinica, 2005, 27(2): 151-174

[7] An H B, Bai Z Z. On efficient variants and global convergence of the Newton-GMRES method[J]. Journal of Numerical Methods and Computer Applications, 2005, 26(4): 291-300

[8] 徐钟济. 蒙特卡罗方法[M]. 上海：上海科学技术出版社，1985
Xu Z J. Monte Carlo Method[M]. Shanghai: Shanghai Science and Technology Press, 1985

[9] 全忠，向淑晃. 基于 GMRES 的多项式预处理广义极小残差法[J]. 计算数学，2006, 28(4): 365-376
Quan Z, Xiang S H. A GMRES method based on polynomial preconditioning algorithm[J]. Mathematica Numerica Sinica, 2006, 28(4): 365-376

[10] Niu Q, *et al.* Accelerate weighted GMRES by augmenting error approximations[J]. International Journal of Computer Mathematics, 2010, 87(9): 2101-2112

[11] 杨圣炜，卢琳璋. 一种加权的 Simpler GMRES 算法[J]. 厦门大学学报 (自然科学版)，2008, 47(4): 484-488
Yang S W, Lu L Z. A weighted Simple GMRES[J]. Journal of Xiamen University (Natural Science), 2008, 47(4): 484-488

[12] 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

[13] Jing Y F, Huang T Z. Restarted weighted full orthogonalization method for shifted linear systems[J]. Computers and Mathematics with Applications, 2009, 57(9): 1583-1591

[14] Najafi H S, Zareamoghaddam H. A new computational GMRES method[J]. Applied Mathematics and Computation, 2008, 199(2): 527-534

[15] Najafi H S, Ghazvini H. Weighted restarting method in the weighted Arnoldi algorithm for computing the eigenvalues of a nonsymmetric matrix[J]. Applied Mathematics and Computation, 2006, 175(2): 1276-1287

[16] Meng B. A weighted GMRES method augmented with eigenvectors[J]. Far East Journal of Mathematical Sciences, 2009, 34(2): 165-176

[17] Salyor P E, Smolarski D C. Implementation of an adaptive algorithm for Richardson's method[J]. Linear Algebra and its Applications, 1991, 154-156: 615-646

[18] 罗奇，等. 计算流体力学[M]. 北京：科学出版社，1983
Roach, *et al.* Computational Fluid Mechanics[M]. Beijing: Science Press, 1983

A Weighted GMRES Method Based on Polynomial Preconditioning Generalized Minimal Residual Method

GUAN Peng-yan[1], LI Chun-guang[2,†], JING He-fang[2]

(1- School of Information and Computing Science, Beifang University of Nationalities, Yinchuan 750021; 2- Research Institute of Numerical Computation and Engineering Applications, Beifang University of Nationalities, Yinchuan 750021)

Abstract: Essai presented a weighted GMRES method (GMRES) by improving GMRES method to solve nonsymmetric linear systems. The method has good convergence, but the computation cost is increasing. In this paper, we propose an efficient polynomial preconditioner based on WGMRES, and obtain a new algorithm. Numerical experiments indicate that the new algorithm can considerably reduce the iterative steps and computation cost.

Keywords: polynomial preconditioning; weighted Arnoldi; weighted GMRES; iterative methods; sudden expansion parallel plates

Received: 31 Dec 2012. **Accepted:** 07 Nov 2013.

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (91230111).

[†]**Corresponding author:** C. Li. E-mail address: cglizd@hotmail.com