

第四讲 Krylov 子空间方法



目录

- 4.1 投影方法
- 4.2 Krylov 子空间与 Arnoldi 过程
- 4.3 非对称线性方程组
- 4.4 对称线性方程
- 4.5 收敛性分析
- 4.6 基于双正交化过程的迭代方法
- 4.7 免转置迭代方法
- 4.8 正规方程的迭代方法

子空间方法

子空间方法基本思想: 降维

原问题: $Ax = b \iff \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|$

降维: 设 \mathcal{K} 是 \mathbb{R}^n 的一个子空间, $\dim(\mathcal{K}) = m \ll n$.

将原问题转化 (近似) 为: $\min_{x \in \mathcal{K}} \|b - Ax\|$ 或 $\min_{x \in \mathcal{K}} \|x - x_*\|$

优点: 自由度大大减少, 问题规模从 n 降为 m

运算量主要集中在矩阵向量乘积, 非常适合稀疏线性方程组

问题: 怎么找合适的子空间? 怎么计算最佳近似解? 怎么加快收敛速度?

4-1 | 投影方法

什么是投影方法

在 \mathcal{K} 中寻找 x_* 在某种意义下的最佳近似

定解条件: 设置 m 个约束 \rightarrow 保证最佳近似存在唯一

在通常情况下, 我们要求残量满足正交性条件:

$$r = b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}, \quad (4.1)$$

其中 \tilde{x} 是我们所要寻找的近似解, \mathcal{L} 是另一个 m 维子空间.

 正交性条件 (4.1) 称为 **Petrov-Galerkin 条件**. 若 $\mathcal{L} = \mathcal{K}$, 则称为 **Galerkin 条件**

 子空间 \mathcal{L} 也称为**约束空间**, \mathcal{K} 通常称为**搜索空间**.

子空间投影法的一般描述

因此, 投影方法一般可以描述为

$$\text{find } \tilde{x} \in \mathcal{K} \quad \text{such that} \quad b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}. \quad (4.2)$$

子空间投影法的一般描述

因此, 投影方法一般可以描述为

$$\text{find } \tilde{x} \in \mathcal{K} \text{ such that } b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}. \quad (4.2)$$

如果给定初值 $x^{(0)}$, 为了能够充分利用初值的相关信息, 我们改为在仿射空间 $x^{(0)} + \mathcal{K}$ 中寻找最佳近似, 即

$$\text{find } \tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K} \text{ such that } b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}. \quad (4.3)$$

子空间投影法的一般描述

因此, 投影方法一般可以描述为

$$\text{find } \tilde{x} \in \mathcal{K} \quad \text{such that} \quad b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}. \quad (4.2)$$

如果给定初值 $x^{(0)}$, 为了能够充分利用初值的相关信息, 我们改为在仿射空间 $x^{(0)} + \mathcal{K}$ 中寻找最佳近似, 即

$$\text{find } \tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K} \quad \text{such that} \quad b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}. \quad (4.3)$$

事实上, 如果将 \tilde{x} 写成: $\tilde{x} = x^{(0)} + \hat{x}$, 其中 $\hat{x} \in \mathcal{K}$, 则 (4.3) 就是

$$\text{find } \hat{x} \in \mathcal{K} \quad \text{such that} \quad r_0 - A\hat{x} \perp \mathcal{L}, \quad (4.4)$$

其中 $r_0 = b - Ax^{(0)}$ 是初始残量. 这与 (4.2) 的形式是一样的.

子空间方法需要考虑的三个问题

- 如何选择 \mathcal{K} 和 \mathcal{L} ?
- 如何计算近似解 \tilde{x} ?
- 若 \tilde{x} 不满足精度要求, 如何寻找新的 \mathcal{K} 和 \mathcal{L} ?

近似解的计算

设 $V = [v_1, v_2, \dots, v_m]$ 和 $W = [w_1, w_2, \dots, w_m]$ 分别是 \mathcal{K} 和 \mathcal{L} 一组基.

近似解的计算

设 $V = [v_1, v_2, \dots, v_m]$ 和 $W = [w_1, w_2, \dots, w_m]$ 分别是 \mathcal{K} 和 \mathcal{L} 一组基.

由于 $\tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K}$, 即 $\tilde{x} - x^{(0)} \in \mathcal{K}$, 因此存在向量 $y = [y_1, y_2, \dots, y_m]^T \in \mathbb{R}^m$ 使得

$$\tilde{x} = x^{(0)} + Vy$$

近似解的计算

设 $V = [v_1, v_2, \dots, v_m]$ 和 $W = [w_1, w_2, \dots, w_m]$ 分别是 \mathcal{K} 和 \mathcal{L} 一组基.

由于 $\tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K}$, 即 $\tilde{x} - x^{(0)} \in \mathcal{K}$, 因此存在向量 $y = [y_1, y_2, \dots, y_m]^T \in \mathbb{R}^m$ 使得

$$\tilde{x} = x^{(0)} + Vy$$

根据正交性条件可得

$$r_0 - AVy \perp w_i, \quad (i = 1, 2, \dots, m) \implies W^T AVy = W^T r_0$$

近似解的计算

设 $V = [v_1, v_2, \dots, v_m]$ 和 $W = [w_1, w_2, \dots, w_m]$ 分别是 \mathcal{K} 和 \mathcal{L} 一组基.

由于 $\tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K}$, 即 $\tilde{x} - x^{(0)} \in \mathcal{K}$, 因此存在向量 $y = [y_1, y_2, \dots, y_m]^T \in \mathbb{R}^m$ 使得

$$\tilde{x} = x^{(0)} + Vy$$

根据正交性条件可得

$$r_0 - AVy \perp w_i, \quad (i = 1, 2, \dots, m) \implies W^T AVy = W^T r_0$$

若 $W^T AV$ 非奇异, 则 $y = (W^T AV)^{-1} W^T r_0 \implies \tilde{x} = x^{(0)} + V(W^T AV)^{-1} W^T r_0$

 在实际计算中, 矩阵 $W^T AV$ 通常可以直接形成, 而无需另外计算.

定理 如果 A , K 和 L 满足下面条件之一

(1) A 正定且 $L = K$;

(2) A 非奇异且 $L = AK$,

则矩阵 W^TAV 非奇异.

(留作练习)

子空间 \mathcal{K} 和 \mathcal{L} 的选取

在实施投影方法时, 我们需要考虑下面两个问题:

- 怎样选择搜索空间 \mathcal{K} 和约束空间 \mathcal{L} ?
- 如果找到的近似解 \tilde{x} 达不到精度要求, 则需要更换搜索空间 \mathcal{K} , 此时如何更新 \mathcal{K} ?

目前能够很好地解决上面两个问题的方法是采用 **Krylov 子空间**.

4-2 | Krylov 子空间与 Arnoldi 过程

4.2 Krylov 子空间与 Arnoldi 过程

4.2.1 Krylov 子空间

4.2.2 Arnoldi 过程

<https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/IMP>

4-2-1 | Krylov 子空间

设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $r \in \mathbb{R}^n$, 我们称

$$\mathcal{K}_m(A, r) \triangleq \text{span}\{r, Ar, \dots, A^{m-1}r\} \subseteq \mathbb{R}^n$$

是由 A 和 r 生成的 **Krylov 子空间**, 通常简记为 \mathcal{K}_m , 或 \mathcal{K} .



4-2-1 | Krylov 子空间

设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $r \in \mathbb{R}^n$, 我们称

$$\mathcal{K}_m(A, r) \triangleq \text{span}\{r, Ar, \dots, A^{m-1}r\} \subseteq \mathbb{R}^n$$

是由 A 和 r 生成的 **Krylov 子空间**, 通常简记为 \mathcal{K}_m , 或 \mathcal{K} .



基本性质

- $\dim(\mathcal{K}_m) \leq m$
- Krylov 子空间是嵌套的, 即: $\mathcal{K}_1 \subseteq \mathcal{K}_2 \subseteq \dots \subseteq \mathcal{K}_m \subseteq \dots$
- $\mathcal{K}_m(A, r) = \left\{ x = p(A)r : p \text{ 为次数不超过 } m-1 \text{ 的多项式} \right\}$

Krylov 子空间方法

以 Krylov 子空间为搜索空间的迭代法就是 Krylov 子空间方法

Krylov 子空间方法

以 Krylov 子空间为搜索空间的迭代法就是 **Krylov 子空间方法**

约束空间 \mathcal{L} 的选取

目前被广泛采用的取法有:

- $\mathcal{L} = \mathcal{K}$: 如 FOM, CG, SYMMLQ → **正交投影法**
- $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$: 如 MINRES, GMRES
- $\mathcal{L} = \mathcal{K}(A^T, r)$: 如 BiCG

不同的 \mathcal{L} 导出不同的 Krylov 子空间方法

4-2-2 | Arnoldi 过程

构造 K_m 的一组 标准正交基 \rightarrow Arnoldi 过程

算法 1 基于 MGS (Modified Gram-Schmidt) 的 Arnoldi 过程

```
1: 计算  $v_1 = r/\|r\|_2$ 
2: for  $j = 1, 2, \dots, m - 1$  do
3:    $w_j = Av_j$ 
4:   for  $i = 1, 2, \dots, j$  do
5:      $h_{ij} = (w_j, v_i)$ 
6:      $w_j = w_j - h_{ij}v_i$ 
7:   end for
8:    $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$ 
9:   if  $h_{j+1,j} = 0$  then break, end if
10:   $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$ 
11: end for
```



注记

➤ 如果计算到第 k ($k < m$) 步时有 $h_{k+1,k} = 0$, 则方法会 **提前终止**.

此时 Av_k 必定可以由 v_1, v_2, \dots, v_k 线性表出 (不考虑舍入误差)

➤ 算法中的向量 v_i 称为 **Arnoldi 向量**.

需要指出的是, 在算法中我们是用 A 乘以 v_j , 然后与之前的 Arnoldi 向量正交化, 而不是用 $A^j r$. (事实上, 它们是等价的)

引理 如果 Arnoldi 过程不提前终止 (即 $h_{k+1,k} \neq 0, k = 1, 2, \dots, m-1$), 则

$$v_j \in \mathcal{K}_j(A, r), \quad j = 1, 2, \dots, m.$$

(板书)

\mathcal{K}_m 的标准正交基

定理 如果 Arnoldi 过程不提前终止, 则向量 v_1, v_2, \dots, v_m 构成 \mathcal{K}_m 的一组标准正交基, 其中

$$\mathcal{K}_m(A, r) = \text{span}\{r, Ar, \dots, A^{m-1}r\}.$$

Arnoldi 过程的矩阵表示

由 Arnoldi 过程可知 $h_{j+1,j}v_{j+1} = Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$, 因此

$$Av_j = h_{j+1,j}v_{j+1} + \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i$$

$$= [v_1, v_2, \dots, v_{j+1}] \begin{bmatrix} h_{1j} \\ h_{2j} \\ \vdots \\ h_{j+1,j} \end{bmatrix} = [v_1, \dots, v_{j+1}, v_{j+2}, \dots, v_{m+1}] \begin{bmatrix} h_{1j} \\ \vdots \\ h_{j+1,j} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$
$$= V_{m+1}H_{m+1,m}(:, j),$$

定理 设 $V_m = [v_1, v_2, \dots, v_m]$, 则

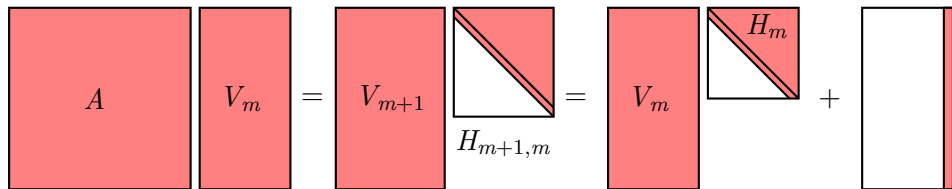
$$AV_m = V_{m+1}H_{m+1,m} = V_mH_m + h_{m+1,m}v_{m+1}e_m^T, \quad (4.5)$$

$$V_m^T AV_m = H_m, \quad (4.6)$$

其中 $e_m = [0, \dots, 0, 1]^T \in \mathbb{R}^m$, $H_m = H_{m+1,m}(1:m, 1:m) \in \mathbb{R}^{m \times m}$

$$H_{m+1,m} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1,m-1} & h_{1,m} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2,m-1} & h_{2,m} \\ 0 & h_{32} & \cdots & h_{3,m-1} & h_{2,m} \\ 0 & 0 & \cdots & h_{4,m-1} & h_{4,m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & h_{m,m-1} & h_{m,m} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{m+1,m} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+1) \times m}.$$

定理中的结论可以由下图表示.



Arnoldi 过程提前终止

如果 Arnoldi 过程提前终止, 则我们可以得到一个不变子空间.

定理 如果 Arnoldi 过程在第 k ($k \leq m$) 步终止, 即 $h_{k+1,k} = 0$, 则有

$$A V_k = V_k H_k,$$

即 \mathcal{K}_k 是 A 的一个不变子空间.

Krylov 子空间方法

Krylov 子空间方法的一般流程:

- (1) 令 $m = 1$
- (2) 定义 Krylov 子空间 $\mathcal{K}_m(A, r_0)$;
- (3) 在仿射空间 $x^{(0)} + \mathcal{K}_m$ 中找出原问题的近似解 ($b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}$);
- (4) 如果这个近似解满足精度要求, 则迭代结束;
否则令 $m \leftarrow m + 1$, 返回第 (2) 步.

Krylov 子空间方法的基本框架

- 1: 选取初始向量 $x^{(0)}$
- 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$, $v_1 = r_0 / \|r_0\|_2$
- 3: 寻找近似解: $x^{(1)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_1$
- 4: **if** $x^{(1)}$ 满足精度要求 **then**
- 5: 终止迭代
- 6: **end if**
- 7: **for** $m = 2$ to n **do**
- 8: 调用 Arnoldi 过程计算向量 v_m
- 9: 寻找近似解: $x^{(m)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_m$ $(b - Ax^{(m)} \perp \mathcal{L})$
- 10: **if** $x^{(m)}$ 满足精度要求 **then**
- 11: 终止迭代
- 12: **end if**
- 13: **end for**

4-3 | 非对称线性方程组

4.3 非对称线性方程组

4.3.1 完全正交方法 (FOM) $\rightarrow \mathcal{L} = \mathcal{K}$

4.3.2 广义极小残量法 (GMRES) $\rightarrow \mathcal{L} = A\mathcal{K}$

4.3.3 GMRES 实施细节

4.3.4 带重启的 GMRES

4-3-1 | 完全正交方法 (FOM)

取 $\mathcal{L}_m = \mathcal{K}_m$, 得到的方法为**完全正交方法** (Full Orthogonalization Method)

$$\text{find } \tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_m \text{ such that } b - A\tilde{x} \perp \mathcal{K}_m$$

设 $\tilde{x} = x^{(0)} + V_m \tilde{y}$, 其中 $\tilde{y} \in \mathbb{R}^m$. 由正交性条件 $b - A\tilde{x} \perp \mathcal{K}_m$ 可知

$$\begin{aligned} 0 &= V_m^\top (b - A\tilde{x}) = V_m^\top (b - Ax^{(0)} - AV_m \tilde{y}) \\ &= V_m^\top r_0 - V_m^\top A V_m \tilde{y} \\ &= V_m^\top (\beta v_1) - V_m^\top A V_m \tilde{y} = \beta e_1 - H_m \tilde{y} \end{aligned}$$

如果 H_m 非奇异, 则 $\tilde{y} = H_m^{-1} \beta e_1$. 所以

$$\tilde{x} = x^{(0)} + \beta V_m H_m^{-1} e_1.$$

算法 2 完全正交方法 (FOM)

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$, 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$ 和 $\beta = \|r_0\|_2$
- 2: 计算 $v_1 = r_0/\beta$
- 3: **for** $j = 1, 2, \dots, m - 1$ **do** % 开始迭代
- 4: $w_j = Av_j$
- 5: **for** $i = 1, 2, \dots, j$ **do** % Arnoldi 过程
- 6: $h_{ij} = (w_j, v_i)$, $w_j = w_j - h_{ij}v_i$
- 7: **end for**
- 8: $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$
- 9: **if** $h_{j+1,j} = 0$, **then** set $m = j$ and break, **end if** % Arnoldi 过程提前终止
- 10: $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$
- 11: **end for**
- 12: 求解线性方程组 $H_m \tilde{y} = \beta e_1$
- 13: 计算近似解 $\tilde{x} = x^{(0)} + V_m \tilde{y}$

注记

- 由于 m 通常远远小于 n , 因此 $H_m \tilde{y} = \beta e_1$ 可通过直接法求解, 比如列主元 LU 分解或基于 Givens 变换的 QR 分解.
- FOM 方法的一个难点是如何选取 m .
实际计算时, 我们采用动态调整的方法, 不断增长 m 的值, 直到残量满足精度要求. 因此, 在每一次迭代后, 需要估计残量的范数.

残量的计算

定理 设 $\tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_m$ 是由 FOM 算法得到的近似解, 则

$$\tilde{r} \triangleq b - A\tilde{x} = -h_{m+1,m} (e_m^\top \tilde{y}) v_{m+1},$$

其中 $\tilde{y} = \beta H_m^{-1} e_1$, $e_m = [0, \dots, 0, 1]^\top \in \mathbb{R}^m$. 因此,

$$\|\tilde{r}\|_2 = h_{m+1,m} |e_m^\top \tilde{y}| = h_{m+1,m} |\tilde{y}(m)|.$$

(板书)

注记

- 每次迭代结束我们就可以直接计算出残量 \tilde{r} 的范数, 当满足精度要求时, 我们再计算近似解 \tilde{x} .
- 在不考虑舍入误差的情况下, 当 $m = n$ 时, 必有 $\|\tilde{r}\|_2 = 0$.
- 如果 Arnoldi 过程提前终止, 即存在整数 k ($k < n$) 使得 $h_{k+1,k} = 0$, 则由定理可知, 此时 $\tilde{r} = 0$, 因此近似解 \tilde{x} 就是方程组的精确解.

算法 3 实用的 FOM 方法

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$ 和 (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$
- 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r_0\|_2$ 和 $v_1 = r_0/\beta$
- 3: **for** $j = 1, 2, \dots$ **do** % 这里可以设置最大迭代步数
- 4: $w_j = Av_j$
- 5: **for** $i = 1, 2, \dots, j$ **do**
- 6: $h_{ij} = (w_j, v_i)$, $w_j = w_j - h_{ij}v_i$
- 7: **end for**
- 8: $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$
- 9: 求解方程 $H_j \tilde{y} = \beta e_1$
- 10: **if** $h_{j+1,j}|\tilde{y}(j)|/\beta < \varepsilon$ **then** % relative residual
- 11: break
- 12: **end if**
- 13: $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$
- 14: **end for**
- 15: 计算近似解 $\tilde{x} = x^{(0)} + V_j \tilde{y}$

4-3-2 | 广义极小残量法 (GMRES)

约束空间取为 $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$, 则可得到 GMRES 方法:

$$\text{寻找 } \tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K} \text{ 满足 } b - A\tilde{x} \perp A\mathcal{K}. \quad (4.7)$$

广义极小残量法 (Generalized Minimum Residual, GMRES) 是当前最受欢迎的 Krylov 子空间方法之一, 也是求解非对称线性方程组的首选方法.

GMRES 的最优性质

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则 \tilde{x} 是 (4.7) 的解当且仅当 \tilde{x} 是下面的极小化问题的解

$$\min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}} \|b - Ax\|_2, \quad (4.8)$$

即在仿射空间 $x^{(0)} + \mathcal{K}$ 中, \tilde{x} 所对应的残量范数最小.

(板书)

近似解的计算

对任意 $x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_m$, 存在向量 $y \in \mathbb{R}^m$ 使得 $x = x^{(0)} + V_m y$, 于是

$$\begin{aligned} b - Ax &= b - A(x^{(0)} + V_m y) \\ &= r_0 - AV_m y = \beta v_1 - V_{m+1} H_{m+1,m} y = V_{m+1}(\beta e_1 - H_{m+1,m} y), \end{aligned} \quad (4.9)$$

其中 $e_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^{m+1}$.

近似解的计算

对任意 $x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_m$, 存在向量 $y \in \mathbb{R}^m$ 使得 $x = x^{(0)} + V_m y$, 于是

$$\begin{aligned} b - Ax &= b - A(x^{(0)} + V_m y) \\ &= r_0 - AV_m y = \beta v_1 - V_{m+1} H_{m+1,m} y = V_{m+1}(\beta e_1 - H_{m+1,m} y), \end{aligned} \quad (4.9)$$

其中 $e_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^{m+1}$. 又 V_{m+1} 的列向量是标准正交的, 故

$$\|b - Ax\|_2 = \|V_{m+1}(\beta e_1 - H_{m+1,m} y)\|_2 = \|\beta e_1 - H_{m+1,m} y\|_2.$$

因此, 最小化问题 (4.8) 的解为 $\tilde{x} = x^{(0)} + V_m \tilde{y}$, 其中 \tilde{y} 是下面最小二乘问题的解

$$\min_{y \in \mathbb{R}^m} \|\beta e_1 - H_{m+1,m} y\|_2$$

最小二乘问题求解

通常 m 不是很大, 因此可以使用 QR 方法来求解.

最小二乘问题求解

通常 m 不是很大, 因此可以使用 QR 方法来求解.

设 $H_{m+1,m} = Q_{m+1}^T R_{m+1,m}$, 于是

$$\begin{aligned}\|\beta e_1 - H_{m+1,m}y\|_2 &= \|\beta e_1 - Q_{m+1}^T R_{m+1,m}y\|_2 \\ &= \|\beta Q_{m+1} e_1 - R_{m+1,m}y\|_2 = \left\| \beta q_1 - \begin{bmatrix} R_m \\ 0 \end{bmatrix} y \right\|_2,\end{aligned}$$

其中 q_1 是 Q_{m+1} 的第一列, $R_m \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 表示 $R_{m+1,m}$ 的前 m 行.

最小二乘问题求解

通常 m 不是很大, 因此可以使用 QR 方法来求解.

设 $H_{m+1,m} = Q_{m+1}^T R_{m+1,m}$, 于是

$$\begin{aligned}\|\beta e_1 - H_{m+1,m}y\|_2 &= \|\beta e_1 - Q_{m+1}^T R_{m+1,m}y\|_2 \\ &= \|\beta Q_{m+1} e_1 - R_{m+1,m}y\|_2 = \left\| \beta q_1 - \begin{bmatrix} R_m \\ 0 \end{bmatrix} y \right\|_2,\end{aligned}$$

其中 q_1 是 Q_{m+1} 的第一列, $R_m \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 表示 $R_{m+1,m}$ 的前 m 行.

所以 y 可以通过求解下面的上三角方程组获得

$$R_m \tilde{y} = \beta q_1(1:m) \tag{4.10}$$

其中 $q_1(1:m)$ 表示 q_1 的前 m 个元素组成的向量.

残量的计算

定理 设 $\tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_m$ 是由 GMRES 方法所得到的近似解, 则

$$\|\tilde{r}\|_2 = \|b - A\tilde{x}\|_2 = \beta |q_1(m+1)|,$$

其中 $q_1(m+1)$ 表示 $q_1 \in \mathbb{R}^{m+1}$ 的最后一个分量.

(板书)

算法 4 广义极小残量法 (GMRES)

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$ 和 (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$
- 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r_0\|_2$ 和 $v_1 = r_0/\beta$
- 3: **for** $j = 1, 2, \dots$ **do** % 开始迭代, 可以设置最大迭代步数
- 4: $w_j = Av_j$
- 5: **for** $i = 1, 2, \dots, j$ **do** % Arnoldi process
- 6: $h_{ij} = (w_j, v_i)$, $w_j = w_j - h_{ij}v_i$
- 7: **end for**
- 8: $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$
- 9: **if** $h_{j+1,j} = 0$, **then** set $m = j$ and break, **end if** % Arnoldi 过程提前终止
- 10: $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$
- 11: **if** $\|\tilde{r}\|_2/\beta < \varepsilon$, **then** set $m = j$ and break, **end if** % check convergence
- 12: **end for**
- 13: 求解上三角线性方程组 $R_m \tilde{y} = \beta q_1(1:m)$ % 回代求解
- 14: 计算近似解 $\tilde{x} = x^{(0)} + V_m \tilde{y}$

GMRES 的提前终止

如果在第 k ($k < n$) 步时有 $h_{k+1,k} = 0$, 则 GMRES 会提前终止, 此时

$$AV_k = V_k H_k, \quad \tilde{y} = H_k^{-1}(\beta e_1).$$

因此

$$\begin{aligned} \|\tilde{r}\|_2 &= \|b - A\tilde{x}\|_2 = \|b - Ax^{(0)} - AV_k\tilde{y}\|_2 \\ &= \|r_0 - V_k H_k \tilde{y}\|_2 = \|\beta v_1 - V_k(\beta e_1)\|_2 = 0. \end{aligned}$$

这意味着 \tilde{x} 就是原方程组的精确解. 因此, **这种提前终止是好事.**

反之, 如果在第 k 步时有 $\tilde{r} = b - A\tilde{x} = 0$, 则必有 $h_{k+1,k} = 0$.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 非奇异, 则 GMRES 方法在第 k 步提前终止的充要条件是近似解即为精确解. (留作练习)

4-3-3

GMRES 方法的实施细节

需要解决的问题

- (1) 残量范数计算: $\|\tilde{r}\|_2 = \beta|q_1(m+1)| \rightarrow$ 计算 $H_{j+1,j}$ 的 QR 分解.
- (2) 最后的求解: $R_m\tilde{y} = \beta q_1(1:m) \rightarrow$ 计算 $H_{j+1,j}$ 的 QR 分解.

设计高效的 $H_{j+1,j}$ 的 QR 分解算法  ① Givens 变换; ② 递推方法.

$H_{j+1,j}$ 的 QR 分解的递推算法

- 1 当 $j = 1$ 时, 对 $H_{2,1} \in \mathbb{R}^{2 \times 1}$ 直接做一次 Givens 变换即可得到其 QR 分解.

$H_{j+1,j}$ 的 QR 分解的递推算法

- 1 当 $j = 1$ 时, 对 $H_{2,1} \in \mathbb{R}^{2 \times 1}$ 直接做一次 Givens 变换即可得到其 QR 分解.
- 2 假定 $H_{j,j-1} \in \mathbb{R}^{j \times (j-1)}$ 的 QR 分解 (基于 Givens 变换) 为

$$H_{j,j-1} = (G_{j-1}G_{j-2} \cdots G_1)^\top R_{j,j-1} = Q_j^\top \begin{bmatrix} R_{j-1} \\ 0 \end{bmatrix}_{j \times (j-1)}$$

其中 $R_{j-1} \in \mathbb{R}^{(j-1) \times (j-1)}$ 是上三角矩阵.

$H_{j+1,j}$ 的 QR 分解的递推算法

- 1 当 $j = 1$ 时, 对 $H_{2,1} \in \mathbb{R}^{2 \times 1}$ 直接做一次 Givens 变换即可得到其 QR 分解.
- 2 假定 $H_{j,j-1} \in \mathbb{R}^{j \times (j-1)}$ 的 QR 分解 (基于 Givens 变换) 为

$$H_{j,j-1} = (G_{j-1}G_{j-2} \cdots G_1)^\top R_{j,j-1} = Q_j^\top \begin{bmatrix} R_{j-1} \\ 0 \end{bmatrix}_{j \times (j-1)}$$

其中 $R_{j-1} \in \mathbb{R}^{(j-1) \times (j-1)}$ 是上三角矩阵.

- 3 考虑 $H_{j+1,j} = \begin{bmatrix} H_{j,j-1} & h_j \\ 0 & h_{j+1,j} \end{bmatrix}$ 的 QR 分解, 其中 h_j 是 $H_{j+1,j}$ 最后一列的前 j 行.

$$\begin{bmatrix} Q_j & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} H_{j+1,j} = \begin{bmatrix} Q_j H_{j,j-1} & h_j \\ 0 & h_{j+1,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{j-1} \\ 0 \end{bmatrix} & Q_j h_j \\ 0 & h_{j+1,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{j-1} & \tilde{h}_{j-1} \\ 0 & \hat{h}_{j,j} \\ 0 & h_{j+1,j} \end{bmatrix},$$

其中 \tilde{h}_{j-1} 是 $Q_j h_j$ 的前 $j-1$ 行, $\hat{h}_{j,j}$ 是 $Q_j h_j$ 的最后一个元素.

下面利用 Givens 变换, 将 $h_{j+1,j}$ 化为 0. 计算

$$\tilde{h}_{j,j} = \sqrt{\hat{h}_{j,j}^2 + h_{j+1,j}^2}, \quad c_j = \frac{\hat{h}_{j,j}}{\tilde{h}_{j,j}}, \quad s_j = \frac{h_{j+1,j}}{\tilde{h}_{j,j}}.$$

构造 Givens 变换 $G_j = \begin{bmatrix} I_{j-1} & 0 & 0 \\ 0 & c_j & s_j \\ 0 & -s_j & c_j \end{bmatrix}$, 令 $Q_{j+1} = G_j \begin{bmatrix} Q_j & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(j+1) \times (j+1)}$, 则

$$Q_{j+1}H_{j+1,j} = G_j \begin{bmatrix} R_{j-1} & \tilde{h}_{j-1} \\ 0 & \hat{h}_{j,j} \\ 0 & h_{j+1,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{j-1} & \tilde{h}_{j-1} \\ 0 & \tilde{h}_{j,j} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \triangleq R_{j+1,j}.$$

所以 $H_{j+1,j} = Q_{j+1}^T R_{j+1,j}$ 就是 $H_{j+1,j}$ 的 QR 分解.

主要工作: ① 计算 $Q_j h_j$ ② 计算 Givens 变换 $G(c_j, s_j)$ 并更新 $\tilde{h}_{j,j}$

需要解决的问题

(1) 残量范数计算: $\|\tilde{r}\|_2 = \beta|q_1(j+1)|$

☞ $q_1 = Qe_1 = G_j(G_{j-1} \cdots G_1 e_1)$, 逐次计算, 每次迭代只需一次 Givens 变换

(2) 最后的求解: $R_m \tilde{y} = \beta q_1(1:m)$

☞ 逐次计算 R 的第 j 列, $G_j G_{j-1} \cdots G_1 H(1:j+1, j)$, 每次迭代需执行 j 次 Givens 变换

实施细节

➤ H , Q 和 R 的维数都是随着迭代步数的增加而不断变大

➤ 实际计算时:

① 不用计算 Q , 保存所有 Givens 变换即可

② R 可以直接存放在 H 中.

算法 5 实用的 GMRES 方法

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$ 和 (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$
- 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$, $\beta = \|r_0\|_2$ 和 $v_1 = r_0/\beta$
- 3: 令 $\xi = \beta e_1$ % 用于计算和存放 q_1
- 4: **for** $j = 1, 2, \dots$ **do** % 开始迭代, 可以设置最大迭代步数
- 5: $w_j = Av_j$
- 6: **for** $i = 1, 2, \dots, j$ **do** % Arnoldi process
- 7: $h_{ij} = (w_j, v_i)$, $w_j = w_j - h_{ij}v_i$
- 8: **end for**
- 9: $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$
- 10: **for** $i = 1, 2, \dots, j-1$ **do** % Apply G_{j-1}, \dots, G_1 to the last column of $H_{j+1,j}$
- 11:
$$\begin{bmatrix} h_{i,j} \\ h_{i+1,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_i & s_i \\ -s_i & c_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{i,j} \\ h_{i+1,j} \end{bmatrix}$$
- 12: **end for**
- 13: **if** $h_{j+1,j} = 0$, **then** set $m = j$ and break, **end if** % Arnoldi 过程提前终止

```

14:  $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$ 
15: if  $|h_{j,j}| > |h_{j+1,j}|$  then % Form the Givens rotation  $G_j$ 
16:      $c_j = \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}}$ ,  $s_j = c_j\tau$  where  $\tau = \frac{h_{j+1,j}}{h_{j,j}}$ 
17: else
18:      $s_j = \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}}$ ,  $c_j = s_j\tau$  where  $\tau = \frac{h_{j,j}}{h_{j+1,j}}$ 
19: end if
20:  $h_{j,j} = c_j h_{j,j} + s_j h_{j+1,j}$ ,  $h_{j+1,j} = 0$  % Apply  $G_j$  to last column of  $H_{j+1,j}$ 

21: 
$$\begin{bmatrix} \xi_j \\ \xi_{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_j & s_j \\ -s_j & c_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_j \\ 0 \end{bmatrix}$$
 % Apply  $G_j$  to the right-hand side
22: if  $|\xi_{j+1}|/\beta < \varepsilon$ , then set  $m = j$  and break, end if % Check convergence
23: end for
24: 计算  $\tilde{y} = R_m^{-1}\xi^{(m)}$ , 其中  $R_m = H(1:m, 1:m)$ ,  $\xi^{(m)} = \xi(1:m)$ 
25: 计算近似解  $\tilde{x} = x^{(0)} + V_m\tilde{y}$ 

```

☞ 注 1: 运算量主要集中在矩阵向量乘积, 即 Av_j .

☞ 注 2: 在某些特定场合, Arnoldi 过程中可使用 Householder 变换以增加稳定性.

4-3-4

带重启的 GMRES

为什么要重启

- 在不考虑舍入误差的情况下, 当 GMRES 方法迭代到 n 步时, 残量肯定为 0, 因此方法肯定收敛.
- 但对于大规模的线性方程组, 我们不可能迭代 n 步, 因为 GMRES 每一步迭代的运算量和存储量都会随着迭代步数的增加而增加, 所以当迭代步数很大时, 运算时间和存储量会大大增加, 这使得方法失去竞争性.
- 因此我们希望将迭代步数控制在一个能接受的范围内. 目前实现这一目标的通用做法是采用**重启**策略, 即给定一个最大迭代步数 m (通常远远小于 n , 如 20, 50 等) 如果 GMRES 迭代到 m 步后仍不收敛, 则计算出近似解 $x^{(m)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_m$. 然后将其作为新的迭代初值, 即令 $x^{(0)} = x^{(m)}$, 重新启动 GMRES 方法. 该过程可以重复执行, 直到找到满意的近似解为止.

算法 6 GMRES(m): 带重启的 GMRES 方法

- 1: 给定正整数 $m \ll n$, 初值 $x^{(0)}$ 和 (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$
 - 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$ 和 $\beta = \|r_0\|_2$
 - 3: $v_1 = r_0/\beta$
 - 4: **for** $j = 1, 2, \dots, m$ **do**
 - 5: 执行 GMRES 算法 5 的第 5 步至第 22 步
 - 6: **end for**
 - 7: 计算 $\tilde{y} = R_m^{-1}\xi^{(m)}$, 其中 $R_m = H(1:m, 1:m)$, $\xi^{(m)} = \xi(1:m)$
 - 8: 计算近似解 $\tilde{x} = x^{(0)} + V_m\tilde{y}$
 - 9: **if** $|\xi_{m+1}|/\beta < \varepsilon$ **then**
 - 10: stop and output the results
 - 11: **end if**
 - 12: 令 $x^{(0)} = x^{(m)}$, 返回第 2 步
-

重启带来的不利因素

- 加入重启技术可以节省运算量和存储量, 但随之也会带来一些负面效应. 如收敛速度会减慢, 这是因为在重启方法时, 一些有用信息会被丢弃.
- 如果 A 不是正定矩阵, 则可能还会出现方法停滞不前的情形, 即残量范数很难减小. 此时即使总迭代步数已经达到 n 步, 或者甚至超过 n 步, 但方法仍然不收敛.
- 另外, 怎样选取合适的重启步数 m , 目前仍然没有很好的办法.

举例 (一)

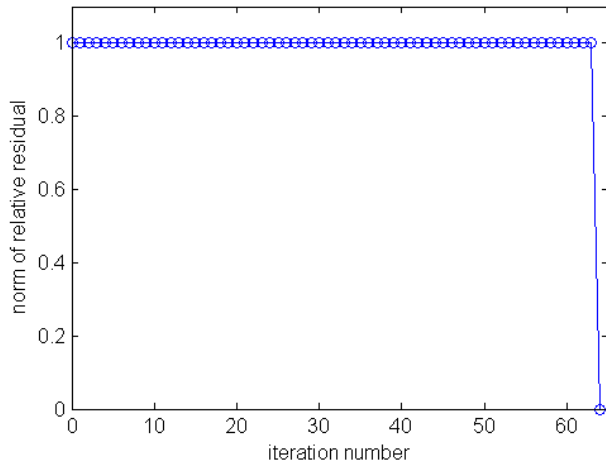
由 GMRES 的最优性质可知, 残量范数 $\|r_k\|_2$ 递减, 但不一定严格递减. 在最坏的情况下, 可能会出现 $\|r_k\|_2$ 保持不变, 直到最后一步才降为 0.

例 考虑线性方程组 $Ax = b$, 其中

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 \\ a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-1} & a_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

求解过程参见 MATLAB 程序 [GMRES_Example01.m](#).

$n = 64$ 时的 (相对) 残量范数下降曲线



💡 对于该问题, 重启 GMRES 将导致算法失败.

举例 (二)

例 考虑下面的带齐次 Dirichlet 边界条件的偏微分方程:

$$-\Delta u(x, y) + u_x(x, y) + u_y(x, y) + u(x, y) = f(x, y),$$

$$(x, y) \in \Omega \triangleq [0, 1] \times [0, 1]$$

$$u(x, 0) = u(x, 1) = u(0, y) = u(1, y) = 0, \quad 0 < x, y < 1.$$

用五点差分离散, 步长 $h_x = h_y = 1/(N+1)$, 可得

$$\frac{4u_{i,j} - u_{i+1,j} - u_{i-1,j} - u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{h^2} + \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} + \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2h} + u_{i,j} = f_{i,j}.$$

对应的离散线性方程组为

$$[I \otimes T + T \otimes I + h(I \otimes D) + h(D \otimes I) + h^2 I]u = h^2 f.$$

其中 $T = \text{tridiag}(-1, 2, -1)$, $D = \text{tridiag}(-1/2, 0, 1/2)$.

在测试中, 我们假设解析解为

$$u(x, y) = xy(1 - x)(1 - y).$$

由此可以求出右端项

$$f(x, y) = (3 - 2x)(1 - y)y + (3 - 2y)(1 - x)x + x(1 - x)y(1 - y).$$

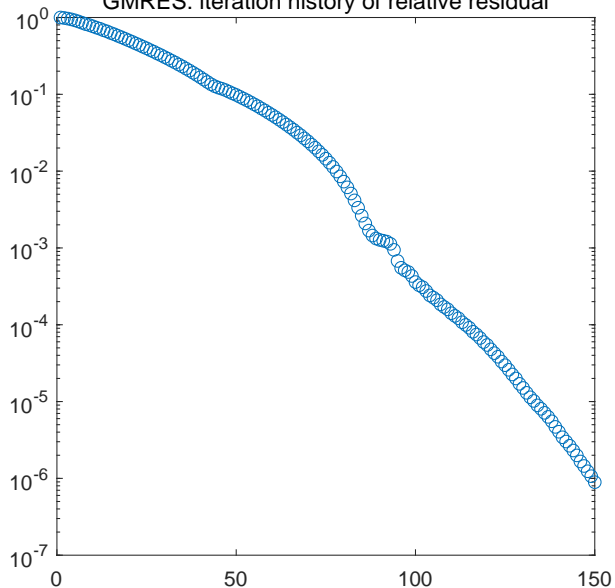
由于系数矩阵是非对称的, 因此用 GMRES 方法求解. 最大迭代步数设为 $\text{IterMax} = N^2$, 迭代终止条件

$$\frac{\|r_k\|_2}{\|r_0\|_2} \leq \text{tol} \triangleq 10^{-6}.$$

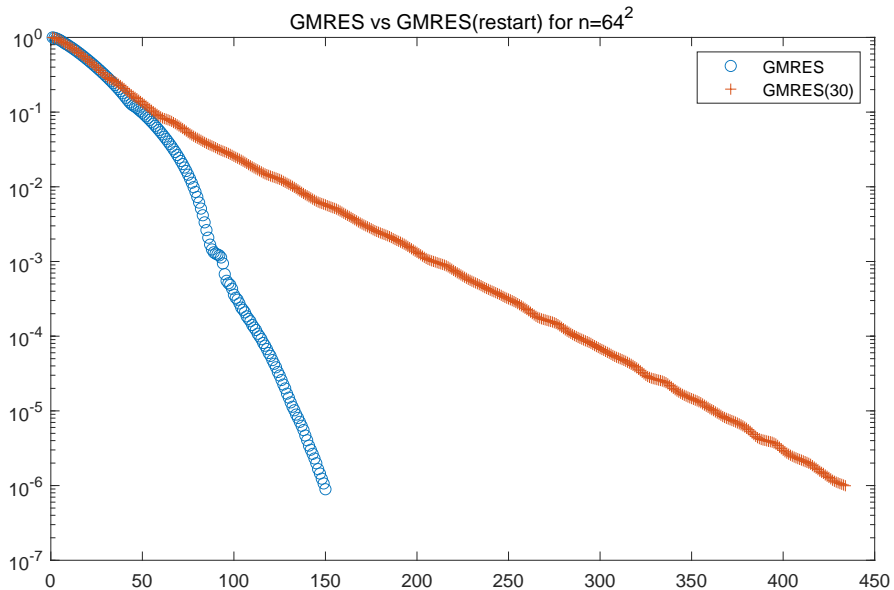
MATLAB 程序见 [GMRES_Example02_PDE.m](#)

$n = 32^2$ 时的相对残量下降曲线.

GMRES: iteration history of relative residual



GMRES vs GMRES(restart) for $n = 64^2$.



4-4 | 对称线性方程

4.4 对称线性方程

4.4.1 Lanczos 过程

4.4.2 共轭梯度法 (CG)

4.4.3 极小残量法 (MINRES)

4.4.4 SYMMLQ 方法

4-4-1 | Lanczos 过程

如果 A 是对称的, 则由 Arnoldi 过程所生成的上 Hessenberg 矩阵 $H_m = V_m^T A V_m$ 也对称, 所以是**对称三对角矩阵**.

为了书写方便, 我们记 $\alpha_j = h_{j,j}$, $\beta_j = h_{j,j+1}$, 并用 T 来表示, 即

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} & \\ & & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix}.$$

三项递推公式

与 Arnoldi 过程一样, 我们有下面的性质

$$AV_k = V_k T_k + \beta_k v_{k+1} e_k^T, \quad (4.11)$$

$$V_k^T A V_k = T_k. \quad (4.12)$$

考察关系式 (4.11) 两边的第 j 列可知

$$\beta_j v_{j+1} = Av_j - \alpha_j v_j - \beta_{j-1} v_{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots,$$

这里我们令 $v_0 = 0$ 和 $\beta_0 = 0$.

Lanczos 过程

算法 7 基于三项递推公式的 Lanczos 过程

- 1: 给定非零向量 r , 令 $v_0 = 0, \beta_0 = 0$
- 2: 计算 $v_1 = r/\|r\|_2$
- 3: **for** $j = 1, 2, \dots$ **do**
- 4: $w_j = Av_j - \beta_{j-1}v_{j-1}$ % 三项递推公式
- 5: $\alpha_j = (w_j, v_j)$
- 6: $\tilde{w}_j = w_j - \alpha_j v_j$
- 7: $\beta_j = \|\tilde{w}_j\|_2$
- 8: **if** $\beta_j = 0$ **then**
- 9: **break**
- 10: **end if**
- 11: $v_{j+1} = \tilde{w}_j/\beta_j$
- 12: **end for**

Lanczos 向量的正交性

如果不考虑舍入误差, 则 Lanczos 过程生成的向量是相互正交的.

定理 设 $v_1, v_2, \dots, v_k, \dots$ 由 Lanczos 算法生成, 则

$$(v_i, v_j) = \delta_{ij} \triangleq \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j, \end{cases} \quad \text{for } i, j = 1, 2, \dots \quad (4.13)$$

(留作课外自习)

注记

- 在 Lanczos 过程中, 我们只需正交化相邻的三个向量即可. 因此在计算过程中只需存储三个向量, 而且每个迭代步的运算量也是固定不变的.
- 在实际计算中, 由于舍入误差的原因, Lanczos 算法生成的向量可能会逐渐失去正交性. 这时需要采取一些补救措施, 如重新全部正交化或部分正交化.

4-4-2

共轭梯度法 (CG)

共轭梯度法 (Conjugate Gradient, CG) 是当前求解大规模**对称正定**线性方程组的首选方法. 事实上, CG 方法与 FOM 方法是等价的, 即选取的约束空间为 $\mathcal{L} = \mathcal{K}$. 但由于 A 是对称正定的, 因此我们可以借助三项递推公式来简化运算.

共轭梯度法

设 $x^{(0)}$ 是迭代初值, 我们需要在仿射空间 $x^{(0)} + \mathcal{K}_k$ 中寻找近似解 $x^{(k)}$, 满足

$$x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k \quad \text{且} \quad b - Ax^{(k)} \perp \mathcal{K}_k. \quad (4.14)$$

计算公式推导

与 FOM 方法类似, 我们可得

$$x^{(k)} = x^{(0)} + V_k y_k, \quad y_k = T_k^{-1}(\beta e_1^{(k)}), \quad (4.15)$$

其中 $e_1^{(k)} = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^k$.

- 由于 A 对称正定, 所以 T_k 也对称正定, 因此可以使用 LDL^T 分解进行求解.
- 设 T_k 的 LDL^T 分解为 $T_k = L_k D_k L_k^T$, 于是可得

$$x^{(k)} = x^{(0)} + V_k y_k = x^{(0)} + V_k T_k^{-1}(\beta e_1^{(k)}) = x^{(0)} + (V_k L_k^{-T})(\beta D_k^{-1} L_k^{-1} e_1^{(k)}).$$

- 如果 $x^{(k)}$ 满足精度要求, 则计算结束, 否则需要计算

$$x^{(k+1)} = x^{(0)} + V_{k+1} T_{k+1}^{-1}(\beta e_1^{(k+1)}) = x^{(0)} + (V_{k+1} L_{k+1}^{-T})(\beta D_{k+1}^{-1} L_{k+1}^{-1} e_1^{(k+1)}),$$

这里假定 T_{k+1} 的 LDL^T 分解为 $T_{k+1} = L_{k+1} D_{k+1} L_{k+1}^T$.

下面考虑如何通过递推方式来计算 $x^{(k+1)}$, 记

$$\begin{aligned}\tilde{P}_k &\triangleq V_k L_k^{-\top} = [\tilde{p}_1, \tilde{p}_2, \dots, \tilde{p}_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}, \\ \tilde{y}_k &\triangleq \beta D_k^{-1} L_k^{-1} e_1^{(k)} = [\eta_1, \dots, \eta_k]^\top \in \mathbb{R}^k. \quad k = 1, 2, \dots\end{aligned}$$

引理 下面的递推公式成立:

$$\begin{aligned}\tilde{P}_{k+1} &\triangleq V_{k+1} L_{k+1}^{-\top} = [\tilde{P}_k, \tilde{p}_{k+1}], \\ \tilde{y}_{k+1} &\triangleq \beta D_{k+1}^{-1} L_{k+1}^{-1} e_1^{(k+1)} = [\tilde{y}_k^\top, \eta_{k+1}]^\top, \quad k = 1, 2, \dots\end{aligned}$$

(板书)

证明.

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} & \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k & \end{bmatrix}, \quad T_{k+1} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} & \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k & \beta_k \\ & & & \beta_k & \alpha_{k+1} \end{bmatrix}.$$

设 T_k 的 LDL^T 分解为

$$T_k = L_k D_k L_k^T = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_1 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & l_{k-1} & \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & & \\ & d_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & d_k & \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_1 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & l_{k-1} & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}^T.$$

由待定系数法可知 $d_1 = \alpha_1$, $l_i = \beta_i/d_i$, $d_{i+1} = \alpha_{i+1} - l_i\beta_i$, $i = 1, 2, \dots, k-1$.

记 $\gamma_k = [0, \dots, 0, \beta_k]^\top \in \mathbb{R}^k$ 则

$$\begin{aligned}
 T_{k+1} &= \begin{bmatrix} T_k & \gamma_k \\ \gamma_k^\top & \alpha_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_k & 0 \\ * & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_k & \\ & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_k & 0 \\ * & 1 \end{bmatrix}^\top = L_{k+1} D_{k+1} L_{k+1}^\top \\
 &= \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ l_1 & 1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & & l_{k-1} & 1 & \\ & & & & \mathbf{l_k} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & & & \\ & d_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & & d_k & \\ & & & & & \mathbf{d_{k+1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ l_1 & 1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & \\ & & & l_{k-1} & 1 & \\ & & & & \mathbf{l_k} & 1 \end{bmatrix}^\top,
 \end{aligned}$$

其中 $\boxed{l_k = \beta_k/d_k, d_{k+1} = \alpha_{k+1} - l_k \beta_k}$. 记 $\tilde{\gamma}_k = [0, \dots, 0, l_k]^\top \in \mathbb{R}^k$, 则

$$L_{k+1} = \begin{bmatrix} L_k & 0 \\ \tilde{\gamma}_k^\top & 1 \end{bmatrix}, \quad L_{k+1}^{-1} = \begin{bmatrix} L_k^{-1} & 0 \\ -\tilde{\gamma}_k^\top L_k^{-1} & 1 \end{bmatrix}.$$

所以有

$$\tilde{P}_{k+1} = V_{k+1}L_{k+1}^{-\top} = [V_k, v_{k+1}] \begin{bmatrix} L_k^{-\top} & -L_k^{-\top}\tilde{\gamma}_k \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = [V_kL_k^{-\top}, -V_kL_k^{-\top}\tilde{\gamma}_k + v_{k+1}].$$

又 $V_kL_k^{-\top}\tilde{\gamma}_k = \tilde{P}_k[0, \dots, 0, l_k]^\top = l_k\tilde{p}_k$, 所以 $\tilde{P}_{k+1} = [\tilde{P}_k, \tilde{p}_{k+1}]$, 其中

$$\tilde{p}_{k+1} = -l_k\tilde{p}_k + v_{k+1} \quad (4.16)$$

另外,

$$\begin{aligned} \tilde{y}_{k+1} &= \beta D_{k+1}^{-1} L_{k+1}^{-1} e_1^{(k+1)} \\ &= \beta \begin{bmatrix} D_k^{-1} & 0 \\ 0 & d_{k+1}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_k^{-1} & 0 \\ -\tilde{\gamma}_k^\top L_k^{-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1^{(k)} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta D_k^{-1} L_k^{-1} e_1^{(k)} \\ -\beta d_{k+1}^{-1} \tilde{\gamma}_k^\top L_k^{-1} e_1^{(k)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{y}_k \\ \eta_{k+1} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

因此结论成立. □

递推公式

$$x^{(k)} = x^{(0)} + (V_k L_k^{-\top})(\beta D_k^{-1} L_k^{-1} e_1^{(k)})$$

$$x^{(k+1)} = x^{(0)} + (V_{k+1} L_{k+1}^{-\top})(\beta D_{k+1}^{-1} L_{k+1}^{-1} e_1^{(k+1)})$$

$$\tilde{P}_k \triangleq V_k L_k^{-\top}, \quad \tilde{P}_{k+1} \triangleq V_{k+1} L_{k+1}^{-\top} = [\tilde{P}_k, \tilde{p}_{k+1}]$$

$$\tilde{y}_k \triangleq \beta D_k^{-1} L_k^{-1} e_1^{(k)}, \quad \tilde{y}_{k+1} \triangleq \beta D_{k+1}^{-1} L_{k+1}^{-1} e_1^{(k+1)} = [\tilde{y}_k^\top, \eta_{k+1}]^\top$$

从 $x^{(k)}$ 到 $x^{(k+1)}$ 的递推公式

$$x^{(k+1)} = x^{(0)} + \tilde{P}_{k+1} \tilde{y}_{k+1} = x^{(0)} + [\tilde{P}_k, \tilde{p}_{k+1}] \begin{bmatrix} \tilde{y}_k \\ \eta_{k+1} \end{bmatrix} = x^{(k)} + \eta_{k+1} \tilde{p}_{k+1}. \quad (4.17)$$

残量计算

通过直接计算可知

$$r_{k+1} = b - Ax^{(k+1)} = b - A(x^{(k)} + \eta_{k+1}\tilde{p}_{k+1}) = r_k - \eta_{k+1}A\tilde{p}_{k+1}. \quad (4.18)$$

另一方面, 我们有

$$\begin{aligned} r_k &= b - Ax^{(k)} = b - A(x^{(0)} + V_k y_k) \\ &= r_0 - AV_k y_k = \beta v_1 - V_k T_k y_k - \beta_k v_{k+1} e_k^T y_k = -\beta_k (e_k^T y_k) v_{k+1}, \end{aligned}$$

即 r_k 与 v_{k+1} 平行. 记

$$r_k = \tau_k v_{k+1}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.19)$$

其中

$$\tau_0 = \beta = \|r_0\|_2, \quad \tau_k = -\beta_k (e_k^T y_k), \quad k = 1, 2, \dots$$

\tilde{p}_{k+1} 的计算

记 $p_k = \tau_{k-1}\tilde{p}_k$, $k = 1, 2, \dots$, 由 (4.16) 和 (4.19) 可知

$$p_{k+1} = \tau_k \tilde{p}_{k+1} = \tau_k (v_{k+1} - l_k \tilde{p}_k) = r_k + \mu_k p_k, \quad (4.20)$$

其中 $\mu_k = -\frac{l_k \tau_k}{\tau_{k-1}}$, $k = 1, 2, \dots$ 于是就得到下面的递推公式

$$r_{k+1} = r_k - \eta_{k+1} A \tilde{p}_{k+1} = r_k - \xi_{k+1} A p_{k+1} \quad (4.21)$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \eta_{k+1} \tilde{p}_{k+1} = x^{(k)} + \xi_{k+1} p_{k+1}, \quad (4.22)$$

其中 $\xi_{k+1} = \frac{\eta_{k+1}}{\tau_k}$, $k = 0, 1, 2, \dots$

系数 ξ_{k+1} 和 μ_k 的计算

引理 下面的结论成立:

- (1) $r_1, r_2, \dots, r_k, \dots$ 相互正交;
- (2) $p_1, p_2, \dots, p_k, \dots$ 相互 A 共轭 (或 A 正交), 即当 $i \neq j$ 时有 $p_i^\top A p_j = 0$.

证明. (1) 由于 r_k 与 v_{k+1} 平行, 所以结论成立.

(2) 只需证明 $P_k^\top A P_k$ 是对角矩阵即可, 即证 $\tilde{P}_k^\top A \tilde{P}_k$ 是对角矩阵. 通过直接计算可得

$$\begin{aligned}\tilde{P}_k^\top A \tilde{P}_k &= (V_k L_k^{-\top})^\top A V_k L_k^{-\top} = L_k^{-1} V_k^\top A V_k L_k^{-\top} \\ &= L_k^{-1} T_k L_k^{-\top} \\ &= L_k^{-1} (L_k D_k L_k^\top) L_k^{-\top} = D_k.\end{aligned}$$

□

下面给出 ξ_{k+1} 和 μ_k 的计算公式.

▶ 等式 (4.20) 两边左乘 $p_{k+1}^\top A$ 得 $p_{k+1}^\top A p_{k+1} = p_{k+1}^\top A r_k + \mu_k p_{k+1}^\top A p_k = r_k^\top A p_{k+1}$

▶ 等式 (4.21) 两边左乘 r_k^\top 得 $0 = r_k^\top r_{k+1} = r_k^\top r_k - \xi_{k+1} r_k^\top A p_{k+1}$

$$\text{故 } \xi_{k+1} = \frac{r_k^\top r_k}{r_k^\top A p_{k+1}} = \frac{r_k^\top r_k}{p_{k+1}^\top A p_{k+1}} \quad (4.23)$$

▶ 等式 (4.20) 两边左乘 $p_k^\top A$ 得 $0 = p_k^\top A p_{k+1} = p_k^\top A r_k + \mu_k p_k^\top A p_k$

$$\text{故 } \mu_k = -\frac{p_k^\top A r_k}{p_k^\top A p_k} = -\frac{r_k^\top A p_k}{p_k^\top A p_k}. \quad (4.24)$$

为了进一步减少运算量, 我们将上式进行改写: 等式 (4.21) 两边左乘 r_{k+1}^\top 得

$$r_{k+1}^\top r_{k+1} = r_{k+1}^\top r_k - \xi_{k+1} r_{k+1}^\top A p_{k+1} = -\xi_{k+1} r_{k+1}^\top A p_{k+1}$$

故 $\xi_{k+1} = -\frac{r_{k+1}^\top r_{k+1}}{r_{k+1}^\top A p_{k+1}}$. 所以 $\xi_k = -\frac{r_k^\top r_k}{r_k^\top A p_k}$, 即 $r_k^\top A p_k = -r_k^\top r_k / \xi_k$. 代入 (4.24) 得

$$\mu_k = -\frac{r_k^\top A p_k}{p_k^\top A p_k} = \frac{r_k^\top r_k}{p_k^\top A p_k} \cdot \frac{1}{\xi_k} = \frac{r_k^\top r_k}{p_k^\top A p_k} \cdot \frac{p_k^\top A p_k}{r_{k-1}^\top r_{k-1}} = \frac{r_k^\top r_k}{r_{k-1}^\top r_{k-1}}. \quad (4.25)$$

综合公式 (4.20), (4.21), (4.22) 和 (4.23), (4.25) 即可得 CG 方法的迭代格式:

$$\begin{aligned} p_{k+1} &= r_k + \mu_k p_k, \quad \text{其中} \quad \mu_k = r_k^\top r_k / r_{k-1}^\top r_{k-1}, \\ x^{(k+1)} &= x^{(k)} + \xi_{k+1} p_{k+1}, \\ r_{k+1} &= r_k - \xi_{k+1} A p_{k+1}, \quad \text{其中} \quad \xi_{k+1} = r_k^\top r_k / p_{k+1}^\top A p_{k+1}. \end{aligned}$$

需要指出的是, 以上递推公式是从 $k = 1$ 开始的.

因此 $k = 0$ 时的计算公式需要另外推导.

➤ p_1 的计算: 由 \tilde{p}_1 的定义可知 $\tilde{p}_1 = \tilde{P}_1 = V_1 L_1^{-T} = v_1$. 因此

$$p_1 = \tau_0 \tilde{p}_1 = \beta v_1 = r_0.$$

➤ $x^{(1)}$ 的计算: 由 Lanczos 过程可知 $T_1 = \alpha_1 = v_1^T A v_1$, 注意到 $\beta^2 = r_0^T r_0$, 所以

$$x^{(1)} = x^{(0)} + V_1 T_1^{-1} (\beta e_1) = x^{(0)} + \frac{\beta}{v_1^T A v_1} v_1 = x^{(0)} + \frac{r_0^T r_0}{p_1^T A p_1} p_1.$$

令 $\xi_1 = \frac{r_0^T r_0}{p_1^T A p_1}$ (之前的公式只对 $k \geq 1$ 有定义), 则递推公式对 $k = 0$ 仍然成立.

► r_1 的计算:

$$r_1 = b - Ax^{(1)} = b - Ax^{(0)} - \frac{r_0^\top r_0}{p_1^\top A p_1} A p_1 = r_0 - \xi_1 A p_1,$$

即当 $k = 0$ 时关于 r_{k+1} 的递推公式也成立.

综合公式 (4.20), (4.21), (4.22) 和 (4.23), (4.25) 即可得 CG 方法.

算法 8 共轭梯度法 (CG)

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$, (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$ 和最大迭代步数 IterMax
- 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$ 和 $\beta = \|r_0\|_2$
- 3: **for** $k = 1$ to IterMax **do**
- 4: $\rho = r_{k-1}^\top r_{k-1}$
- 5: **if** $k > 1$ **then**
- 6: $\mu_{k-1} = \rho / \rho_0, \quad p_k = r_{k-1} + \mu_{k-1} p_{k-1}$
- 7: **else**
- 8: $p_k = r_0$
- 9: **end if**
- 10: $q_k = Ap_k, \quad \xi_k = \rho / (p_k^\top q_k)$
- 11: $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \xi_k p_k, \quad r_k = r_{k-1} - \xi_k q_k$
- 12: $\text{relres} = \|r_k\|_2 / \beta$
- 13: **if** $\text{relres} < \varepsilon$, **then** break, **end if**
- 14: $\rho_0 = \rho$
- 15: **end for**
- 16: **if** $\text{relres} < \varepsilon$, 输出近似解 $x^{(k)}$ 及相关信息
- 17: **else** 输出算法失败信息
- 18: **end if**

注记

- (1) 在优化领域, CG 方法中的向量 p_k 称为**搜索方向**, 而 ξ_k 称为**步长**.
因此, 搜索方法是 A 共轭的, 这就是方法名称的由来.
- (2) 在 CG 方法中, 只需要额外存储四个向量 x, p, Ap 和 r ,
每步迭代的主要运算为一个矩阵向量乘积和两个内积.

CG 方法的最优性质

定理 设 A 对称正定, 则

$$x^{(k)} = \arg \min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k} \|x - x_*\|_A \quad (4.26)$$

当且仅当

$$x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k \quad \text{且} \quad b - Ax^{(k)} \perp \mathcal{K}_k. \quad (4.27)$$

(板书)

注记

- GMRES 极小化残量的 2-范数, CG 方法极小化绝对误差的 A 范数或残量的 A^{-1} 范数.
- 如果 A 对称, 但不定, 此时 A 范数就没有定义, 因此最优性结论不再成立.
从方法推导过程可知, 此时仍可以使用 CG 方法, 但由于 LDL^T 分解不一定存在, 因此方法可能会中断.

例 考虑带齐次 Dirichlet 边界条件的 Poisson 方程:

(CG_Poisson2D.m)

$$-\Delta u(x, y) = f(x, y), \quad (4.28)$$

$$(x, y) \in \Omega \triangleq [0, 1] \times [0, 1]$$

$$u(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega.$$

用五点差分离散, 步长为 $h_x = h_y = 1/(N+1)$, 得代数方程组

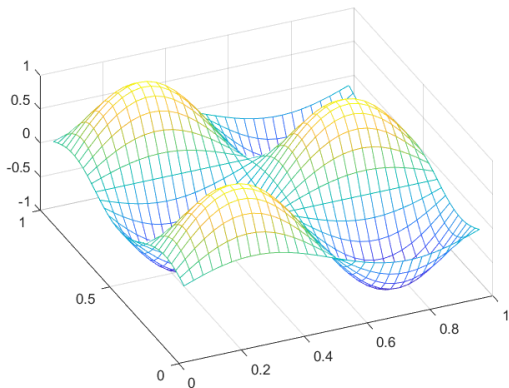
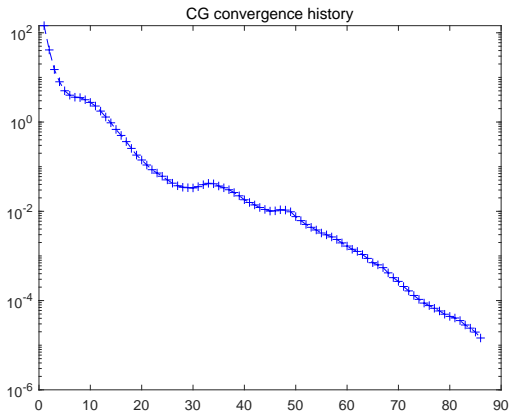
$$(I \otimes T + T \otimes I)u = h^2 f.$$

其中 $T = \text{tridiag}(-1, 2, -1)$, $D = \text{tridiag}(-1/2, 0, 1/2)$.


由于系数矩阵是对称正定的, 因此用 CG 方法求解. 最大迭代步数设为 $\text{IterMax} = N^2$, 迭代终止条件

$$\frac{\|r_k\|_2}{\|r_0\|_2} \leq \text{tol} \triangleq 10^{-6}.$$

设解析解为 $u(x, y) = \sin(2\pi x) \sin(3\pi y)$, 则 $f(x, y) = 13\pi^2 \sin(2\pi x) \sin(3\pi y)$.



$n = 32$ 时的相对残量下降曲线和数值解

 注：程序里的初始向量是一个随机向量，如果取零向量，大家试试结果会怎样。

4-4-3

极小残量法 (MINRES)

假定 A 对称, 但不定, 此时 CG 方法不再适用.

与 GMRES 方法类似, 我们可以取约束空间为 $\mathcal{L}_k = AK_k$, 即

$$\text{find } x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k \text{ such that } b - Ax^{(k)} \perp AK_k$$

这就是 **极小残量法** (MINRES).

MINRES 可以看作是 GMRES 的对称情形, 但由于 A 对称, 因此在计算 \mathcal{K}_k 的单位正交基时, 可以采用 Lanczos 算法, 即三项递推方法, 从而节省运算量.

MINRES 方法的最优性质

与 GMRES 方法类似, MINRES 具有下面的最优性质.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是对称矩阵, $x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k$ 是 MINRES 方法迭代 k 步后得到的近似解, 则

$$x^{(k)} = \arg \min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k} \|b - Ax\|_2,$$

即 $x^{(k)}$ 是残量在仿射空间 $x^{(0)} + \mathcal{K}_k$ 中的唯一最小值点.

由 GMRES 的推导过程可知, 当 MINRES 方法迭代 k 步之后, 近似解可表示为

$$x^{(k)} = x^{(0)} + V_k y_k, \quad (4.29)$$

其中

$$y_k = \arg \min_{y \in \mathbb{R}^k} \|\beta e_1 - T_{k+1,k} y\|_2. \quad (4.30)$$

这里 $T_{k+1,k}$ 是由 Lanczos 算法生成的 $(k+1) \times k$ 的上 Hessenberg 矩阵

$$T_{k+1,k} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} & \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k & \\ & & & \beta_k & \end{bmatrix}.$$

于是, 我们有

$$\begin{aligned}\|\beta e_1 - T_{k+1,k} y\|_2 &= \|\beta e_1 - Q_{k+1}^\top R_{k+1,k} y\|_2 \\ &= \left\| Q_{k+1}(\beta e_1) - \begin{bmatrix} R_k \\ 0 \end{bmatrix} y \right\|_2 = \left\| \beta q_1 - \begin{bmatrix} R_k y \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_2,\end{aligned}$$

其中 $q_1^{(k+1)}$ 是由 Q_{k+1} 的第 1 列. 如果 R_k 非奇异, 则最小二乘问题 (4.30) 的解为

$$y_k = \beta R_k^{-1} q_1^{(k+1)}(1:k)$$

其中 $q_1^{(k+1)}(1:k)$ 表示 $q_1^{(k+1)}$ 的前 k 个分量组成的向量. 因此,

$$x^{(k)} = x^{(0)} + \beta V_k R_k^{-1} q_1^{(k+1)}(1:k) \quad (4.31)$$

残量范数为

$$\|r_k\|_2 = \|\beta e_1 - T_{k+1,k} y_k\|_2 = \beta |q_1^{(k+1)}(k+1)|.$$

因此,

$$T_{k+1,k} = \left[\begin{array}{c|c} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta_{k-1} \\ \alpha_k \end{matrix} \\ \hline T_{k,k-1} & \\ \hline 0 & \beta_k \end{array} \right] = \begin{bmatrix} Q_k^\top & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \left[\begin{array}{c|c} & \begin{matrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta_{k-1} \\ \alpha_k \end{matrix} \\ \hline R_{k,k-1} & Q_k \\ \hline 0 & \beta_k \end{array} \right] \triangleq \begin{bmatrix} Q_k^\top & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tilde{T}_{k+1,k},$$

$$\text{其中 } Q_k \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta_{k-1} \\ \alpha_k \end{bmatrix} = G_{k-1} G_{k-2} \cdots G_1 \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta_{k-1} \\ \alpha_k \end{bmatrix} = G_{k-1} G_{k-2} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta_{k-1} \\ \alpha_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tau_{k-2}^{(3)} \\ \tau_{k-1}^{(2)} \\ \tilde{\alpha}_k \end{bmatrix}.$$

构造 Givens 变换 $G_k = \begin{bmatrix} I_{k-1} & & \\ & c_k & s_k \\ & -s_k & c_k \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times (k+1)}$, (针对 $\begin{bmatrix} \tilde{\alpha} \\ \beta_k \end{bmatrix}$)

消去 $\tilde{T}_{k+1,k}$ 最后一列的最后一个元素 β_k , 即选取

$$c_k = \frac{\tilde{\alpha}_k}{\tau_k^{(1)}}, \quad s_k = \frac{\beta_k}{\tau_k^{(1)}} \quad \text{其中} \quad \tau_k^{(1)} = \sqrt{\tilde{\alpha}_k^2 + \beta_k^2}.$$

由于 $R_{k,k-1}$ 的最后一行全为 0, 且左乘 G_k 只会影响 $\tilde{T}_{k+1,k}$ 的最后两行, 因此

$$G_k \tilde{T}_{k+1,k} = \left[\begin{array}{c|c} & 0 \\ & \vdots \\ & 0 \\ R_{k,k-1} & \begin{matrix} \tau_{k-2}^{(3)} \\ \tau_{k-1}^{(2)} \\ \tau_k^{(1)} \end{matrix} \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cccc} \tau_1^{(1)} & \tau_1^{(2)} & \tau_1^{(3)} & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \tau_{k-3}^{(3)} \\ & & & \ddots & \tau_{k-2}^{(2)} & \tau_{k-2}^{(3)} \\ & & & & \tau_{k-1}^{(1)} & \tau_{k-1}^{(2)} \\ & & & & & \tau_k^{(1)} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{array} \right] \triangleq R_{k+1,k}.$$

于是我们就得到 $T_{k+1,k}$ 的 QR 分解

$$T_{k+1,k} = Q_{k+1}^T R_{k+1,k},$$

其中 (这里我们假定 Givens 变换 G_i 的维数是自动增长的)

$$Q_{k+1} = G_k \begin{bmatrix} Q_k & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = G_k G_{k-1} \dots G_1.$$

需要指出的是, $R_{k,k-1}$ 是 $R_{k+1,k}$ 的前 k 行和前 $k-1$ 列.

因此, R_{k-1} 是 R_k 的 $k-1$ 阶顺序主子矩阵.

$x^{(k)}$ 的递推计算公式

$$x^{(k)} = x^{(0)} + \beta V_k R_k^{-1} q_1^{(k+1)}(1:k)$$

► 设 $P_k = [p_1, p_2, \dots, p_k] \triangleq V_k R_k^{-1}$, 通过直接计算, 由 $P_k R_k = V_k$ 可知

$$p_1 = v_1 / \tau_1^{(1)}, \quad p_2 = (v_2 - \tau_1^{(2)} p_1) / \tau_2^{(1)}, \quad (4.32)$$

$$p_i = (v_i - \tau_{i-1}^{(2)} p_{i-1} - \tau_{i-2}^{(3)} p_{i-2}) / \tau_i^{(1)}, \quad i = 3, 4, \dots, k.$$

又 $V_k = [V_{k-1}, v_k]$, 且 R_{k-1} 是 R_k 的 $k-1$ 阶顺序主子矩阵, 所以

$$P_k = [P_{k-1}, p_k].$$

► 用 $\xi^{(k)}$ 表示 $\beta q_1^{(k+1)}(1:k)$, 即

$$\beta q_1^{(k+1)} = \begin{bmatrix} \xi^{(k)} \\ \tilde{\xi}_{k+1} \end{bmatrix},$$

又

$$Q_{k+1} = G_k \begin{bmatrix} Q_k & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

所以 $q_1^{(k+1)}(1:k-1) = q_1^{(k)}(1:k-1)$, 即 $q_1^{(k+1)}$ 和 $q_1^{(k)}$ 的前 $k-1$ 个分量相同, 其中 $q_1^{(k)}$ 表示 Q_k 的第 1 列.

于是我们可以得到 $\xi^{(k)}$ 和 $\xi^{(k-1)}$ 之间的关系式:

$$\xi^{(k)} = \begin{bmatrix} \xi^{(k-1)} \\ \xi_k \end{bmatrix}, \quad k = 2, 3, \dots,$$

其中 ξ_k 表示 $\xi^{(k)}$ 的最后一个分量.

因此 $\xi^{(k)}$ 可以表示为

$$\xi^{(k)} = [\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k]^\top, \quad k = 1, 2, \dots$$

于是

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= x^{(0)} + V_k R_k^{-1} (\beta q_1^{(k+1)}(1:k)) \\ &= x^{(0)} + P_k \xi^{(k)} = x^{(0)} + [P_{k-1}, p_k] \begin{bmatrix} \xi^{(k-1)} \\ \xi_k \end{bmatrix} = \boxed{x^{(k-1)} + \xi_k p_k}, \end{aligned} \quad (4.33)$$

其中 p_k 可通过递推公式 (4.32) 来计算, 而 ξ_k 是 $\beta q_1^{(k+1)}$ 的第 k 个分量, 且

$$\beta q_1^{(k+1)} = \beta Q_{k+1} e_1 = G_k G_{k-1} \cdots G_1 (\beta e_1),$$

即向量 $\beta q_1^{(k+1)}$ 可以通过将 Givens 变换依次作用在 βe_1 上得到.

残量范数的计算

$$\|r_k\|_2 = \|b - Ax^{(k)}\|_2 = |\beta q_1^{(k+1)}(k+1)| = |\tilde{\xi}_{k+1}|,$$

其中 $\tilde{\xi}_{k+1}$ 是 $\beta q_1^{(k+1)}$ 的最后一个分量.

MINRES 迭代格式

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \xi_k p_k$$

$$p_k = \left(v_k - \tau_{k-1}^{(2)} p_{k-1} - \tau_{k-2}^{(3)} p_{k-2} \right) / \tau_k^{(1)}$$

$$\beta q_1^{(k+1)} = G_k G_{k-1} \cdots G_1 (\beta e_1), \quad \begin{bmatrix} \tau_{k-2}^{(3)} \\ \tau_{k-1}^{(2)} \\ \tau_k^{(1)} \\ 0 \end{bmatrix} = G_k G_{k-1} G_{k-2} \begin{bmatrix} 0 \\ \beta_{k-1} \\ \alpha_k \\ \beta_k \end{bmatrix}$$

算法 9 Minimal Residual (MINRES) Method

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$, (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$ 和最大迭代步数 IterMax
- 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$ 和 $\beta = \|r_0\|_2$
- 3: 令 $\beta_0 = 0, v_0 = 0, p_{-1} = 0, p_0 = 0$
- 4: $v_1 = r_0/\beta, \quad \xi = \beta e_1$
- 5: **for** $k = 1$ to IterMax **do**
- 6: $w_k = Av_k - \beta_{k-1}v_{k-1}, \quad \alpha_k = (w_k, v_k), \quad w_k = w_k - \alpha_k v_k, \quad \beta_k = \|w_k\|_2$
- 7: **if** $k > 2$ **then** % apply $G_{k-1}G_{k-2}$ to the last column of $T_{k+1,k}$
8:
$$\begin{bmatrix} \tau_{k-2}^{(3)} \\ \tilde{\beta}_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{k-2} & s_{k-2} \\ -s_{k-2} & c_{k-2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \beta_{k-1} \end{bmatrix}$$
- 9: **end if**
- 10: **if** $k > 1$ **then**
11:
$$\begin{bmatrix} \tau_{k-1}^{(2)} \\ \tilde{\alpha}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{k-1} & s_{k-1} \\ -s_{k-1} & c_{k-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\beta}_{k-1} \\ \alpha_k \end{bmatrix}$$
- 12: **end if**
- 13: **if** $|\tilde{\alpha}_k| > |\beta_k|$ **then** % form the Givens rotation G_k
14: set $c_k = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma^2}}, s_k = c_k\gamma$ where $\gamma = \beta_k/\tilde{\alpha}_k$

```

15:  else
16:      set  $s_k = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma^2}}$ ,  $c_k = s_k\gamma$  where  $\gamma = \alpha_k/\tilde{\beta}_k$ 
17:  end if
18:   $\tau_k^{(1)} = c_k\tilde{\alpha}_k + s_j\beta_k$   % apply  $G_k$  to last column of  $\tilde{T}_{k+1,k}$ 
19:  
$$\begin{bmatrix} \xi_k \\ \xi_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_k & s_k \\ -s_k & c_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_k \\ 0 \end{bmatrix}$$
  % apply  $G_k$  to  $\xi$ 
20:   $p_k = \left( v_k - \tau_{k-1}^{(2)}p_{k-1} - \tau_{k-2}^{(3)}p_{k-2} \right) / \tau_k^{(1)}$  where  $p_0 = p_{-1} = 0$ 
21:   $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \xi_k p_k$ 
22:  relres =  $|\xi_{k+1}|/\beta$ 
23:  if relres <  $\varepsilon$ , then break, end if  % check convergence
24:   $v_{k+1} = w_k/\beta_k$ 
25: end for
26: if relres <  $\varepsilon$ , 输出近似解  $x^{(k)}$  及相关信息
27: else 输出算法失败信息
28: end if

```

MINRES vs GMRES

- MINRES 充分利用了系数矩阵的对称性, 这使得每步迭代的运算量不会随着迭代步数的增加而增加;
- 在迭代过程中, 我们不需要存储所有的 v_i 和 p_i , 因此存储量也与迭代步数无关.

注记

CG 方法也可以用来求解对称不定线性方程组, 但可能会产生中断. 关于对称不定线性方程组的 CG 方法和 MINRES 方法的收敛性态比较, 可以参见相关文献.

MINRES 的缺点

- 在 MINRES 中, 我们用三项递推进行正交化, 随着迭代步数的增加, 舍入误差可能会影响正交性.
- 有学者指出, 在 MINRES 中, 舍入误差是按 $\kappa(A)^2$ 的速度增长的. 而在 GMRES 中, 舍入误差只按 $\kappa(A)$ 的速度增长. 因此, 对于坏条件问题, 在使用 MINRES 需要加倍小心, 特别是迭代步数比较大的情况下.
- 另一种替代方法 — SYMMLQ 方法.

4-4-4

SYMMMLQ 方法

SYMMMLQ (Symmetric LQ) 方法是求解对称线性方程组的另外一种方法, 其收敛速度可能不如 MINRES, 但对于坏条件问题, SYMMMLQ 通常比 MINRES 更稳定.

在 SYMMMLQ 方法中, 我们取 $\mathcal{L} = \mathcal{K}$, 即

$$\text{find } x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k \text{ such that } b - Ax^{(k)} \perp \mathcal{K}_k$$

 当 A 对称正定时, SYMMMLQ 方法与 CG 方法是等价的.

近似解的表示

设 $x^{(k)}$ 是 SYMMLQ 在 $x^{(0)} + \mathcal{K}_k$ 中找到的近似解, 则 $x^{(k)}$ 可表示为

$$x^{(k)} = x^{(0)} + V_k y_k, \quad \text{其中 } y_k = T_k^{-1}(\beta e_1).$$

如果 A 不定, 则 T_k 也不定, 因此无法使用 LDL^\top 分解来求解 y_k .

此时, 我们改为对 T_k 进行 LQ 分解 (类似于 QR 分解), 即

$$T_k = \tilde{L}_k Q_k, \tag{4.34}$$

其中 $\tilde{L}_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ 是下三角矩阵, $Q_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ 是正交矩阵. 于是

$$x^{(k)} = x^{(0)} + V_k T_k^{-1}(\beta e_1) = x^{(0)} + V_k Q_k^\top \tilde{L}_k^{-1}(\beta e_1) = x^{(0)} + \tilde{P}_k \tilde{z}^{(k)},$$

其中

$$\tilde{P}_k \triangleq V_k Q_k^\top \in \mathbb{R}^{n \times k}, \quad \tilde{z}^{(k)} \triangleq \tilde{L}_k^{-1}(\beta e_1) \in \mathbb{R}^k.$$

LQ 分解的递推算法

- ① 由于 T_k 是三对角矩阵, 因此 T_k 的 LQ 分解可以通过 Givens 变换实现
- ② T_{k+1} 的 LQ 分解可以在 T_k 的 LQ 分解基础上, 通过一次 Givens 变换得到

▶ 当 $k = 1$ 时, $T_k = \alpha_1$, 令 $L = 1$, $Q = \alpha_1$ 即可.

▶ 当 $k = 2$ 时, $T_2 = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \beta_1 & \alpha_2 \end{bmatrix}$, 只需一次 Givens 变化即可.

▶ 设 T_k 的 LQ 分解为

$$T_k = \tilde{L}_k (G_1 G_2 \cdots G_{k-1})^T \triangleq \tilde{L}_k Q_k,$$

其中 $Q_k = (G_1 G_2 \cdots G_{k-1})^T$. 这里 G_i 是 Givens 变换.

令

$$\tilde{Q}_{k+1} \triangleq \begin{bmatrix} Q_k & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times (k+1)},$$

则

$$T_{k+1} \tilde{Q}_{k+1}^T = \left[\begin{array}{cc|c} & & 0 \\ & & \vdots \\ & T_k & 0 \\ & & \beta_k \\ \hline 0 & \cdots & 0 & 0 & \beta_k & \alpha_{k+1} \end{array} \right] \begin{bmatrix} Q_k^T & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{cc|c} & & 0 \\ & & \vdots \\ & & 0 \\ & \tilde{L}_k & \\ \hline 0 & \cdots & 0 & l_{k+1}^{(3)} & \tilde{\beta}_k & \alpha_{k+1} \end{array} \right],$$

其中

$$\begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & l_{k+1}^{(3)} & \tilde{\beta}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & 0 & \beta_k \end{bmatrix} Q_k^T = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & 0 & \beta_k \end{bmatrix} G_{k-1}.$$

即 $l_{k+1}^{(3)} = -s_{k-1}\beta_k$, $\tilde{\beta}_k = c_{k-1}\beta_k$.

记 \tilde{L}_k 的 $k-1$ 阶顺序主子矩阵为 L_{k-1} , \tilde{L}_{k+1} 的 k 阶顺序主子矩阵为 L_k .

由于 L_k 和 \tilde{L}_k 只有第 (k, k) 元素不同, 因此 L_{k-1} 是 L_k 的 $k-1$ 阶顺序主子矩阵.

递推关系: L_{j-1} 是 L_j 的 $j-1$ 阶顺序主子矩阵, $j = 1, 2, \dots$

令 $z^{(k)} = L_k^{-1}(\beta e_1) \in \mathbb{R}^k$. 由于 $\tilde{z}^{(k)} = \tilde{L}_k^{-1}(\beta e_1)$, 所以

$$z^{(k)} = \begin{bmatrix} z^{(k-1)} \\ z_k \end{bmatrix}, \quad \tilde{z}^{(k)} = \begin{bmatrix} z^{(k-1)} \\ \tilde{z}_k \end{bmatrix},$$

其中 $z^{(k-1)} = L_{k-1}^{-1}(\beta e_1)$, 因此, 我们可以将 $z^{(k)}$ 和 $\tilde{z}^{(k)}$ 写为

$$z^{(k)} = [z_1, \dots, z_{k-1}, z_k]^T, \quad \tilde{z}^{(k)} = [z_1, \dots, z_{k-1}, \tilde{z}_k]^T, \quad k = 1, 2, \dots,$$

其中 $\tilde{z}_k = \frac{l_k^{(1)} z_k}{\tilde{l}_k^{(1)}}$.

由 $L_k z^{(k)} = \beta e_1$ 可知

$$\begin{cases} z_1 = \beta/l_1^{(1)}, & z_2 = -l_2^{(2)} z_1/l_2^{(1)}, \\ z_i = -\left(l_i^{(3)} z_{i-2} + l_i^{(2)} z_{i-1}\right)/l_i^{(1)}, & i = 3, 4, \dots, k. \end{cases} \quad (4.35)$$

分别记 $\tilde{P}_k = V_k Q_k^T$ 和 $\tilde{P}_{k+1} = V_{k+1} Q_{k+1}^T$ 的前 $k-1$ 列和前 k 列为 P_{k-1} 和 P_k , 则

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{k+1} &= V_{k+1} Q_{k+1}^T = [V_k, v_{k+1}] \begin{bmatrix} Q_k^T & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} G_k \\ &= [\tilde{P}_k, v_{k+1}] G_k = [P_{k-1}, \tilde{p}_k, v_{k+1}] \begin{bmatrix} I_{k-1} & & \\ & c_k & s_k \\ & -s_k & c_k \end{bmatrix} \\ &= [P_{k-1}, p_k, \tilde{p}_{k+1}] = [P_k, \tilde{p}_{k+1}], \end{aligned} \quad (4.36)$$

因此, P_k 和 P_{k-1} 有下面的递推关系 $P_k = [P_{k-1}, p_k]$, 所以, P_k 可统一写为

$$P_k = [p_1, p_2, \dots, p_k], \quad k = 1, 2, \dots$$

易知 $\tilde{p}_1 = \tilde{P}_1 = v_1$, 由 (4.36) 可知

$$p_k = c_k \tilde{p}_k - s_k v_{k+1}, \quad \tilde{p}_{k+1} = s_k \tilde{p}_k + c_k v_{k+1}, \quad k = 1, 2, \dots$$

令 $\tilde{x}^{(k)} = x^{(0)} + P_k z^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$, 则

$$\tilde{x}^{(k)} = x^{(0)} + P_k z^{(k)} = x^{(0)} + [P_{k-1}, p_k] \begin{bmatrix} z^{(k-1)} \\ z_k \end{bmatrix} = \tilde{x}^{(k-1)} + z_k p_k, \quad k = 1, 2, \dots \quad (4.37)$$

于是有

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= x^{(0)} + \tilde{P}_{k+1} \tilde{z}^{(k+1)} = x^{(0)} + [P_k, \tilde{p}_{k+1}] \begin{bmatrix} z^{(k)} \\ \tilde{z}_{k+1} \end{bmatrix} \\ &= x^{(0)} + P_k z^{(k)} + \tilde{z}_{k+1} \tilde{p}_{k+1} = \tilde{x}^{(k)} + \tilde{z}_{k+1} \tilde{p}_{k+1}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

有了这个关系式后, 我们在实际计算中只需计算 $\tilde{x}^{(k)}$.

残量范数的计算

与 FOM 类似, 我们可得

$$r_k = b - Ax^{(k)} = -\beta_k(e_k^\top y_k)v_{k+1}, \quad \implies \quad \|r_k\|_2 = |\beta_k(e_k^\top y_k)|.$$

需要计算 $y_k = T_k^{-1}(\beta e_1)$.

但事实上, 我们只需知道 y_k 最后一个分量即可.

注意到 T_k 是对称的, 因此 $T_k^\top y_k = T_k y_k = \beta e_1$, 所以 $\tilde{L}_k^\top y_k = Q_k(\beta e_1)$.

观察上述等式两边的最后一个元素可知

$$\begin{aligned} \tilde{l}_k^{(1)} e_k^\top y_k &= e_k^\top \tilde{L}_k^\top y_k = e_k^\top Q_k(\beta e_1) \\ &= \beta e_k^\top (G_1 G_2 \cdots G_{k-1})^\top e_1 = \beta (G_1 G_2 \cdots G_{k-1} e_k)^\top e_1 = \beta s_1 s_2 \cdots s_{k-1}. \end{aligned}$$

由 Givens 变换 G_k 的具体构造公式可知, $s_k \tilde{l}_k^{(1)} + c_k \beta_k = 0$. 所以

$$r_k = -\beta_k (e_k^\top y_k) v_{k+1} = -\left(\beta s_1 s_2 \cdots s_{k-1} \beta_k / \tilde{l}_k^{(1)}\right) v_{k+1} = (\beta s_1 s_2 \cdots s_{k-1} s_k / c_k) v_{k+1},$$

因此

$$\|r_k\|_2 = |\beta s_1 s_2 \cdots s_{k-1} s_k / c_k| = |c_{k-1} s_k / c_k| \cdot \|r_{k-1}\|_2.$$

算法 10 SYMMLQ 方法

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$, (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$ 和最大迭代步数 IterMax
- 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$ 和 $\beta = \|r_0\|_2$
- 3: $v_1 = r_0/\beta$, $p_1 = v_1$, $\xi_0 = \beta$, $\tilde{x}^{(0)} = x^{(0)}$
- 4: **for** $k = 1, 2, \dots$, **do**
- 5: $w_k = Av_k - \beta_{k-1}v_{k-1}$ where $\beta_0 = 0$ and $v_0 = 0$
- 6: $\alpha_k = (w_k, v_k)$
- 7: $\tilde{w}_k = w_k - \alpha_k v_k$
- 8: $\beta_k = \|\tilde{w}_k\|_2$
- 9: **if** $k = 1$ **then**
- 10: $\tilde{l}_k^{(1)} = \alpha_k$
- 11: **end if**
- 12: **if** $k = 2$ **then**
- 13: $\tilde{\beta}_{k-1} = \beta_{k-1}$
- 14: **end if**
- 15: **if** $k > 2$ **then** % apply G_{k-2} to the last row of T_k

$$16: \quad \begin{bmatrix} l_k^{(3)} & \tilde{\beta}_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \beta_{k-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{k-2} & s_{k-2} \\ -s_{k-2} & c_{k-2} \end{bmatrix}$$

17: **end if**

18: **if** $k > 1$ **then** % form the Givens rotation G_{k-1}

19: **if** $|\tilde{l}_{k-1}^{(1)}| > |\beta_{k-1}|$ **then**

20: set $c_{k-1} = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma^2}}$, $s_{k-1} = -c_{k-1}\gamma$ where $\gamma = \beta_{k-1}/\tilde{l}_{k-1}^{(1)}$

21: **else**

22: set $s_{k-1} = \frac{1}{\sqrt{1+\gamma^2}}$, $c_{k-1} = -s_{k-1}\gamma$ where $\gamma = \tilde{l}_{k-1}^{(1)}/\beta_{k-1}$

23: **end if**

24: **end if**

25: **if** $k > 1$ **then** % apply G_{k-1} to the last two columns of $T_k \tilde{Q}_{k-1}$

$$26: \quad l_{k-1}^{(1)} = \sqrt{\left(\tilde{l}_{k-1}^{(1)}\right)^2 + \beta_{k-1}^2}$$

$$27: \quad \begin{bmatrix} l_k^{(2)} & \tilde{l}_k^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\beta}_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{k-1} & s_{k-1} \\ -s_{k-1} & c_{k-1} \end{bmatrix}$$

28: **end if**

29: **if** $k = 2$ **then** % compute z_k

```

30:      $z_1 = \beta / l_1^{(1)}$ 
31: end if
32: if  $k = 3$  then
33:      $z_2 = -l_2^{(2)} z_1 / l_2^{(1)}$ 
34: end if
35: if  $k > 3$  then
36:      $z_{k-1} = - \left( l_{k-1}^{(3)} z_{k-3} + l_{k-1}^{(2)} z_{k-2} \right) / l_{k-1}^{(1)}$ 
37: end if
38: if  $k = 1$  then    % compute  $p_k$ 
39:      $\tilde{p}_1 = v_1$ 
40: end if
41: if  $k > 1$  then
42:      $p_{k-1} = c_{k-1} \tilde{p}_{k-1} - s_{k-1} v_k$ 
43:      $\tilde{p}_k = s_{k-1} \tilde{p}_{k-1} + c_{k-1} v_k$ 
44: end if
45: if  $k > 1$  then    % update  $\tilde{x}^{(k)}$ 

```

```

46:       $\tilde{x}^{(k-1)} = \tilde{x}^{(k-2)} + z_{k-1}p_{k-1}$ 
47:  end if
48:  if  $k > 1$  then  % check convergence
49:       $\xi_{k-1} = (c_{k-2}s_{k-1}/c_{k-1})\xi_{k-2}$ 
50:      if  $|\xi_{k-1}| < \varepsilon$  then
51:           $x^{(k)} = \tilde{x}_{k-1} + \left( l_k^{(1)} z_k / \tilde{l}_k^{(1)} \right) \tilde{p}_k$ 
52:          stop
53:      end if
54:  end if
55:   $v_{k+1} = \tilde{w}_k / \beta_k$ 
56: end for

```

注记

- 由 $r_k = -\beta_k(e_k^T y_k)v_{k+1}$ 可知, 在 SYMMLQ 方法中, 残量是相互正交的.
- 如果 A 是对称正定的, 则 SYMMLQ 与 CG 等价, 此时 SYMMLQ 极小化 $\|x^{(k)} - x_*\|_A$. 如果 A 是不定的, 则没有这个最优性质. 但可以证明, SYMMLQ 在仿射空间 $x^{(0)} + AK_k(A, r_0)$ 中极小化 $\|x^{(k)} - x_*\|_2$.

4-5 | 收敛性分析

4.5 收敛性分析

4.5.1 CG 方法的收敛性

4.5.2 GMRES 方法的收敛性

<https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/IMP>

- 从理论上讲, 如果不考虑舍入误差的影响, Krylov 子空间方法都将在 n 个迭代步内终止. 但在实际应用中, 我们通常希望收敛时的迭代步数远远小于 n . 另一方面, 由于舍入误差的存在, 使得方法不一定都能在 n 步内收敛.
- 收敛性分析不仅仅是给出理论上的结果, 而且还能用来帮助我们改善方法.

4-5-1 | CG 方法的收敛性

最优性质

$$\|x^{(k)} - x_*\|_A = \min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r_0)} \|x - x_*\|_A$$

记 \mathbb{P}_k 为所有次数不超过 k 的实系数多项式组成的集合, 则

$$\mathcal{K}_k(A, r_0) = \{z = p(A)r_0 : p \in \mathbb{P}_{k-1}\}$$

设 $x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r_0)$, 则存在多项式 $p(t) \in \mathbb{P}_{k-1}$ 使得

$$x = x^{(0)} + p(A)r_0.$$

误差分析


记 $\varepsilon_0 \triangleq x^{(0)} - x_*$, 则

$$x - x_* = \varepsilon_0 + p(A)(b - Ax^{(0)}) = \varepsilon_0 + p(A)(Ax_* - Ax^{(0)}) = (I - Ap(A))\varepsilon_0.$$

于是

$$\|x - x_*\|_A^2 = \varepsilon_0^\top (I - Ap(A))^\top A (I - Ap(A)) \varepsilon_0 \triangleq \varepsilon_0^\top q(A)^\top A q(A) \varepsilon_0$$

其中 $q(t) = 1 - tp(t) \in \mathbb{P}_k$ 满足 $q(0) = 1$.

 令 $A = Q\Lambda Q^\top$, 其中 $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, $\lambda_i > 0$.

记 $y = [y_1, y_2, \dots, y_n]^\top \triangleq Q^\top \varepsilon_0$.

$$\begin{aligned}
\|x^{(k)} - x_*\|_A^2 &= \min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r_0)} \|x - x_*\|_A^2 \\
&= \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \varepsilon_0^\top q(A)^\top A q(A) \varepsilon_0 \\
&= \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \varepsilon_0^\top Q q(\Lambda)^\top \Lambda q(\Lambda) Q^\top \varepsilon_0 \\
&= \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} y^\top q(\Lambda)^\top \Lambda q(\Lambda) y \\
&= \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \sum_{i=1}^n y_i^2 \lambda_i q(\lambda_i)^2 \\
&\leq \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} \{q(\lambda_i)^2\} \sum_{i=1}^n y_i^2 \lambda_i \\
&= \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} \{q(\lambda_i)^2\} y^\top \Lambda y \\
&= \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} \{q(\lambda_i)^2\} \varepsilon_0^\top A \varepsilon_0 = \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} \{q(\lambda_i)^2\} \|\varepsilon_0\|_A^2
\end{aligned}$$

$$\frac{\|x^{(k)} - x_*\|_A^2}{\|x^{(0)} - x_*\|_A^2} \leq \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} \{q(\lambda_i)^2\}$$

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 对称正定, 则由 CG 方法得到的近似解 $x^{(k)}$ 满足

$$\frac{\|x^{(k)} - x_*\|_A}{\|x^{(0)} - x_*\|_A} \leq \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} |q(\lambda_i)|. \quad (4.39)$$

注记

- 需要指出的是, (4.39) 中上界是紧凑的, 即对任意 k , 总存在某个右端项 b 或某个初始值 $x^{(0)}$ (与 k 和 A 有关), 使得 (4.39) 中的等号成立. 也就是说, (4.39) 中的上界描述了 CG 方法在最坏情况下的收敛情况.
- 由于 (4.39) 中的上界依赖于 A 的所有特征值. 在通常情况下, A 的特征值是很难计算的, 因此该结论缺乏实用性.

上界的缩放

如果我们知道 A 的最大和最小特征值, 则可缩放为

$$\frac{\|x^{(k)} - x_*\|_A}{\|x^{(0)} - x_*\|_A} \leq \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} |q(\lambda_i)| \leq \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{\lambda_{\min} \leq \lambda \leq \lambda_{\max}} |q(\lambda)|.$$

利用 Chebyshev 多项式的性质, 我们可以得到下面的结论.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 对称正定, 且其最大与最小特征值分别为 λ_{\max} 和 λ_{\min} , 则

$$\frac{\|x^{(k)} - x_*\|_A}{\|x^{(0)} - x_*\|_A} \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1} \right)^k, \quad (4.40)$$

其中 $\kappa(A) = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ 是 A 的 (谱) 条件数.

(板书)

注记

- ⊛ 需要注意的是, 上界 (4.39) 和 (4.40) 有着本质性的差异. 它们的值可能会相差很大.
所以 (4.40) 并不能完全描述 CG 方法的收敛性质.
- ⊛ A 的条件数越小, 则收敛越快.
但 A 的条件数很大却并不一定表明 CG 收敛会很慢.
- ⊛ 在很多实际应用中, 人们观察到 CG 方法往往具有超收敛性, 即方法的平均收敛速度随着迭代步数的增加而不断加快.

CG 方法的超收敛性

定理 设 A 对称正定, 且其特征值为

$$0 < \lambda_n \leq \cdots \leq \lambda_{n+1-i} \leq b_1 \leq \lambda_{n-i} \leq \cdots \leq \lambda_{j+1} \leq b_2 \leq \lambda_j \leq \cdots \leq \lambda_1.$$

则当 $k \geq i+j$ 时有

$$\frac{\|x^{(k)} - x_*\|_A}{\|x^{(0)} - x_*\|_A} \leq 2 \left(\frac{b-1}{b+1} \right)^{k-i-j} \max_{\lambda \in [b_1, b_2]} \left\{ \prod_{\ell=n+1-i}^n \left(\frac{\lambda - \lambda_\ell}{\lambda_\ell} \right) \prod_{\ell=1}^j \left(\frac{\lambda_\ell - \lambda}{\lambda_\ell} \right) \right\},$$

其中

$$b = \left(\frac{b_2}{b_1} \right)^{\frac{1}{2}} \geq 1.$$

若 A 的特征值聚集在 1 附近, 即除了有限多个特征值外, 其余都在 $[1 - \varepsilon, 1 + \varepsilon]$ 中.

推论 设 A 对称正定, 特征值为

$$0 < \delta \leq \lambda_n \leq \cdots \leq \lambda_{n+1-i} \leq 1 - \varepsilon \leq \lambda_{n-i} \leq \cdots \leq \lambda_{j+1} \leq 1 + \varepsilon \leq \lambda_j \leq \cdots \leq \lambda_1.$$

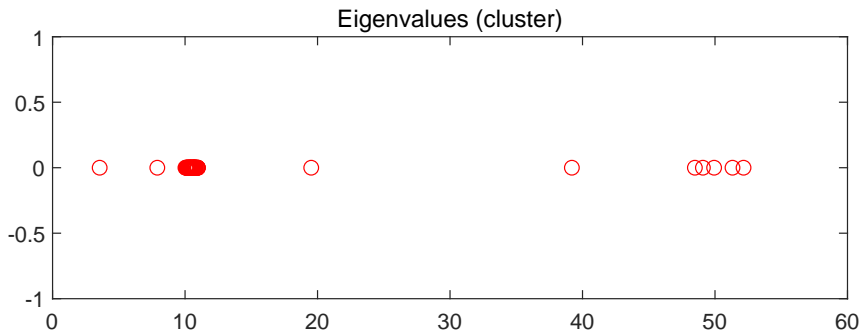
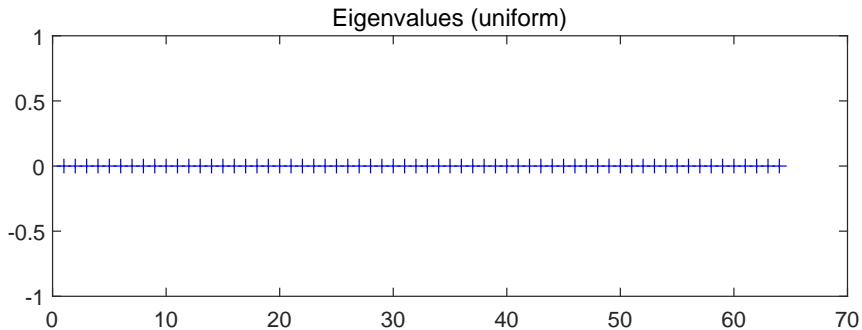
则当 $k \geq i + j$ 时有

$$\frac{\|x^{(k)} - x_*\|_A}{\|x^{(0)} - x_*\|_A} \leq 2 \left(\frac{1 + \varepsilon}{\delta} \right)^i \varepsilon^{k-i-j}.$$

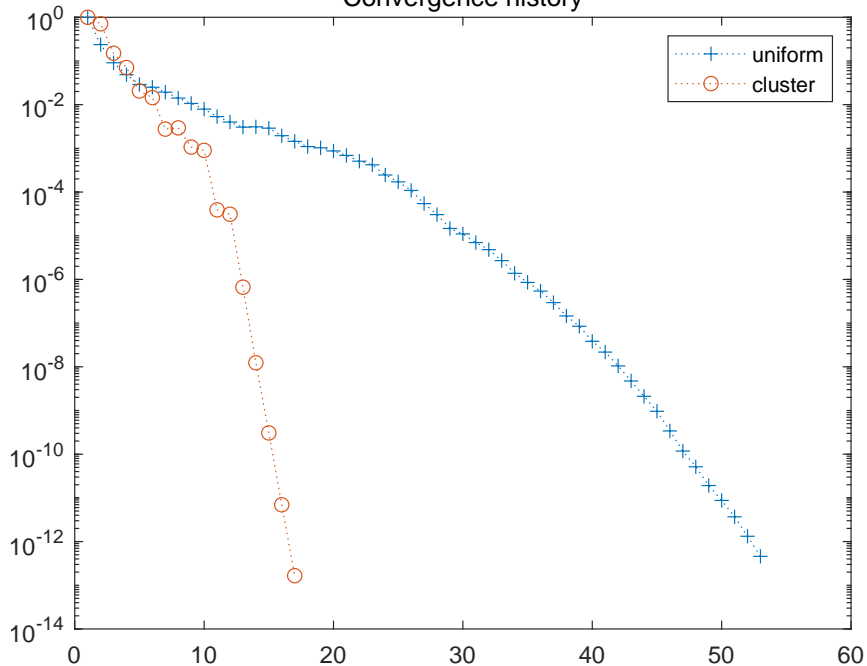
CG 收敛性举例

```
1 n = 64;
2 tol = 1e-12;
3
4 % 特征值均匀分布
5 Lambda = linspace(1,100,n);
6 A = Q*diag(Lambda)*Q';
7 ... ..
8
9 % 特征值聚集分布
10 m = 10;
11 Lambda = [1+(n-1)*rand(m,1); 10*ones(n-m,1)+ 1*rand(n-m,1)];
12 A = Q*diag(Lambda)*Q';
13 ... ..
```

(CG_superconvergence.m)



Convergence history



4-5-2

GMRES 方法的收敛性

GMRES 最优性质

$$\|b - Ax^{(k)}\|_2 = \min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r_0)} \|b - Ax\|_2$$

正规矩阵情形

► 设 A 是正规矩阵, 即 $A = U\Lambda U^*$, 其中 $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, $\lambda_i \in \mathbb{C}$.

► 设 $x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r_0)$, 则存在多项式 $p(t) \in \mathbb{P}_{k-1}$ 使得 $x = x^{(0)} + p(A)r_0$. 于是

$$b - Ax = b - Ax^{(0)} - Ap(A)r_0 = (I - Ap(A))r_0 \triangleq q(A)r_0, \quad (4.41)$$

其中 $q(t) = 1 - tp(t) \in \mathbb{P}_k$ 满足 $q(0) = 1$. 直接计算可知

$$\|b - Ax\|_2 = \|q(A)r_0\|_2 = \|Uq(\Lambda)U^*r_0\|_2 \leq \|U\|_2 \|U^*\|_2 \|q(\Lambda)\|_2 \|r_0\|_2 = \|q(\Lambda)\|_2 \|r_0\|_2.$$

► 又 Λ 是对角矩阵, 所以

$$\|q(\Lambda)\|_2 = \max_{1 \leq i \leq n} |q(\lambda_i)|.$$

► 设 $x^{(k)}$ 是由 GMRES 方法得到的近似解. 由 GMRES 方法的最优性可知

$$\begin{aligned}\|b - Ax^{(k)}\|_2 &= \min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r_0)} \|b - Ax\|_2 \\ &= \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \|q(A)r_0\|_2 \\ &\leq \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \|q(\Lambda)\|_2 \|r_0\|_2 \\ &= \|r_0\|_2 \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} |q(\lambda_i)|.\end{aligned}$$

► 于是, 我们有下面的结论.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是正规矩阵, $x^{(k)}$ 是 GMRES 方法得到的近似解, 则

$$\frac{\|b - Ax^{(k)}\|_2}{\|r_0\|_2} \leq \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} |q(\lambda_i)|. \quad (4.42)$$

► 需要指出的是, 上界 (4.42) 是紧凑的.

误差界的缩放

选取一个包含 A 的所有特征值的区域 $\Omega \subset \mathbb{C}$, 上界缩放为

$$\min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{\lambda \in \Omega} |q(\lambda)|. \quad (4.43)$$

通常 Ω 必须是连通的, 否则 (4.43) 的求解非常困难.

 Ω 不能包含原点.

情形一: Ω 是复平面上的一个圆盘

- 由于 A 是实的, 其特征值关于实轴对称, 可设 Ω 以 $C(c, 0)$ 为圆心, 半径为 $r > 0$ (假定 $r < |c|$, 即原点不在 Ω 内)
- 定义多项式 $q_k(z) = \left(\frac{c-z}{c}\right)^k$, 则 $q_k(z) \in \mathbb{P}_k$ 且 $q_k(0) = 1$. 所以

$$\min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} |q(\lambda_i)| \leq \max_{1 \leq i \leq n} |q_k(\lambda_i)| = \max_{1 \leq i \leq n} \left| \frac{c - \lambda_i}{c} \right|^k \leq \frac{r^k}{|c|^k}.$$

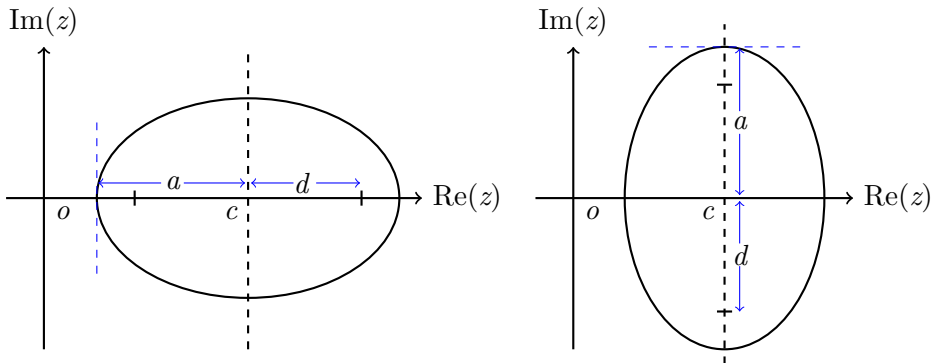
由此可见, 当 r 越小或 c 越大时, 右式趋向于 0 的速度就越快.

结论

设 A 是正规矩阵, 其特征值包含在一个圆盘内, 则圆盘的半径越小或者圆心离原点越远, 则 GMRES 收敛越快.

情形二: Ω 是复平面上的一个椭圆盘

- ▶ 如果用椭圆盘来代替圆盘, 则可得出更紧凑的上界.
- ▶ 设 A 的特征值全部包含在椭圆盘 $E(c, d, a)$ 内, 其中 $d > 0$ 为焦距, $a > 0$ 为半长轴长, $C(c, 0)$ 为椭圆中心. 并且假定原点不在椭圆盘内. 如下图所示.



► 假定椭圆盘 $E(c, d, a)$ 的长轴在实轴上.

令 $T_k(z)$ 为复 Chebyshev 多项式, 则

$$\tilde{T}_k(z) = \frac{T_k\left(\frac{c-z}{d}\right)}{T_k\left(\frac{c}{d}\right)}$$

就是极小极大问题

$$\min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{\lambda \in E(c, d, a)} |q(\lambda)| \quad (4.44)$$

的渐进最优解.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是正规矩阵, $x^{(k)}$ 是由 GMRES 得到的近似解, 则

$$\frac{\|b - Ax^{(k)}\|_2}{\|r_0\|_2} \leq \frac{T_k\left(\frac{a}{d}\right)}{|T_k\left(\frac{c}{d}\right)|} \approx \left(\frac{a + \sqrt{a^2 - d^2}}{c + \sqrt{c^2 - d^2}} \right)^k$$

非正规情形

当 A 不是正规矩阵时, 在一般情况下, GMRES 方法的收敛性很难分析.

➤ 如果 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是可对角化的, 即 $A = X\Lambda X^{-1}$, 则

$$\|b - Ax^{(k)}\|_2 = \min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r_0)} \|b - Ax\|_2 = \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \|q(A)r_0\|_2.$$

相类似地, 我们可以得到下面的结论.

定理 设 $A = X\Lambda X^{-1}$, $x^{(k)}$ 是 GMRES 方法得到的近似解, 则

$$\frac{\|b - Ax^{(k)}\|_2}{\|r_0\|_2} \leq \kappa(X) \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \max_{1 \leq i \leq n} |q(\lambda_i)|,$$

其中 $\kappa(X)$ 是 X 的谱条件数.

注记

- 如果 A 接近正规, 则 $\kappa(X) \approx 1$, 此时定理中的上界在一定程度上能描述 GMRES 的收敛速度. 但如果 X 远非正交, 则 $\kappa(X)$ 会很大, 此时的上界就失去实际意义了.
- 需要指出的是, 上面的分析 **并不意味着非正规矩阵就一定比正规矩阵收敛慢**. 事实上, 对任意一个非正规矩阵, 总存在一个相应的正规矩阵, 使得 GMRES 方法的收敛速度是一样的 (假定初始残量相同)

虽然 GMRES 的收敛性与 A 的特征值有关, 但并不仅仅取决于特征值的分布.

定理 对任意给定的特征值分布和一条不增的曲线, 总存在一个矩阵 A 和一个右端项 b , 使得 A 具有指定的特征值分布, 且 GMRES 的收敛曲线与给定的曲线相同.

如果 A 不可以对角化, 通常会用一个新的极小化问题来近似原来的极小化问题

► 事实上, 我们有

$$\frac{\|b - Ax^{(k)}\|_2}{\|r_0\|_2} = \frac{\min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \|q(A)r_0\|_2}{\|r_0\|_2} \leq \max_{\|v\|_2=1} \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \|q(A)v\|_2 \quad (4.45)$$

$$\leq \min_{q \in \mathbb{P}_k, q(0)=1} \|q(A)\|_2. \quad (4.46)$$

不等式 (4.45) 右端代表的是在最坏情况下的 GMRES 收敛性, 而且是紧凑的.

► 可以证明, 当 A 是正规矩阵时, 上界 (4.45) 和 (4.46) 是相等的.

注记

最后需要指出的是, 收敛性也依赖于迭代初值和右端项. 以上结论中的上界描述的都是最坏情况下的收敛速度. 在实际计算中, 算法的收敛速度可能会比预想的要快得多.

4-6

基于双正交化过程的迭代方法

4.6 基于双正交化过程的迭代方法

4.6.1 双正交化过程

4.6.2 BiCG 方法

4.6.3 QMR 方法

<https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/IMP>

4-6-1 | 双正交化过程

什么是双正交

双正交化过程 (biorthogonalization) 也称为**双边 Lanczos 过程** (two-sided Lanczos Process), 是指同时寻找子空间 $\mathcal{K}(A, r_0)$ 的一组基 $\{v_1, v_2, \dots\}$ 和子空间 $\mathcal{K}(A^T, \tilde{r}_0)$ 的一组基 $\{w_1, w_2, \dots\}$, 使得这两组基之间相互正交, 即 $(v_i, w_j) = 0, i \neq j$. 这样做的优点是**可以利用三项递推公式, 从而节省运算量.

双正交化过程也可以看作是将对称矩阵的 Lanczos 过程推广到非对称情形.

- 在 Lanczos 过程中, v_{k+1} 是通过将 Av_k 与 v_k 和 v_{k-1} 正交化后得到的.
- 在双正交化过程中, v_{k+1} 则是由 Av_k 与 w_k 和 w_{k-1} 正交化后所得到.
- 同时, w_{k+1} 由 $A^T w_k$ 与 v_k 和 v_{k-1} 正交化后得到.

算法 11 双正交化过程

- 1: 给定两个非零向量 r_0, \tilde{r}_0 满足 $(\tilde{r}_0, r_0) \neq 0$
 - 2: 计算 $\beta = \|r_0\|_2$, 令 $\beta_0 = 0, \gamma_0 = 0$
 - 3: $v_1 = r_0/\beta, w_1 = \beta\tilde{r}_0/(\tilde{r}_0, r_0)$ % make sure that $w_1^\top v_1 = 1$
 - 4: **for** $k = 1, 2, \dots$, **do**
 - 5: $\hat{v}_{k+1} = Av_k - \beta_{k-1}v_{k-1}$
 - 6: $\hat{w}_{k+1} = A^\top w_k - \gamma_{k-1}w_{k-1}$
 - 7: $\alpha_k = (v_k, \hat{w}_{k+1})$ % $\alpha_k = w_k^\top Av_k$
 - 8: $\tilde{v}_{k+1} = \hat{v}_{k+1} - \alpha_k v_k$
 - 9: $\tilde{w}_{k+1} = \hat{w}_{k+1} - \alpha_k w_k$
 - 10: $\gamma_k = \sqrt{|(\tilde{v}_{k+1}, \tilde{w}_{k+1})|}$
 - 11: **if** $\gamma_k = 0$, **then** break, **end if** % ghost break down
 - 12: $\beta_k = (\tilde{v}_{k+1}, \tilde{w}_{k+1})/\gamma_k$ % so that $\beta_k\gamma_k = (\tilde{v}_{k+1}, \tilde{w}_{k+1})$
 - 13: $v_{k+1} = \tilde{v}_{k+1}/\gamma_k$
 - 14: $w_{k+1} = \tilde{w}_{k+1}/\beta_k$
 - 15: **end for**
-

双正交性

由双正交化过程可知

$$\gamma_k v_{k+1} = Av_k - \alpha_k v_k - \beta_{k-1} v_{k-1}, \quad (4.47)$$

$$\beta_k w_{k+1} = A^T w_k - \alpha_k w_k - \gamma_{k-1} w_{k-1}, \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (4.48)$$

引理 设双正交化算法前 $m-1$ 步不中断, 则向量组 $\{v_k\}_{k=1}^m$ 和 $\{w_k\}_{k=1}^m$ 双正交, 即

$$W_m^T V_m = I, \quad (4.49)$$

其中 $V_m = [v_1, v_2, \dots, v_m]$, $W_m = [w_1, w_2, \dots, w_m]$.

(板书)

 **注:** β_k 和 γ_k 可自由选取, 只需满足 $\beta_k \gamma_k = (\tilde{v}_{k+1}, \tilde{w}_{k+1})$, 以确保 $(v_{k+1}, w_{k+1}) = 1$.

双正交化过程的性质

将耦合三项递推过程 (4.47) 和 (4.48) 写成矩阵形式即为

$$\begin{aligned}AV_k &= V_{k+1} T_{k+1,k} = V_k T_k + \gamma_k v_{k+1} e_k^\top, \\A^\top W_k &= W_{k+1} T_{k+1,k}^\top = W_k T_k^\top + \beta_k w_{k+1} e_k^\top,\end{aligned}\quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (4.50)$$

其中 $e_k = [0, \dots, 0, 1]^\top \in \mathbb{R}^k$,

$$T_{k+1,k} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \gamma_1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} & \\ & & \gamma_{k-1} & \alpha_k & \\ & & & \gamma_k & \end{bmatrix}_{(k+1) \times k}.$$

这里 $T_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ 是由 $T_{k+1,k}$ 的前 k 行组成的矩阵.

由 (4.49) 和 (4.50) 可知

$$W_k^\top A V_k = W_k^\top V_k T_k + \gamma_k (W_k^\top v_{k+1}) e_k^\top = T_k, \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (4.51)$$


注意, T_k 是三对角矩阵, 但不是对称的. 与 Lanczos 过程类似, 我们有下面的结论.

定理 设算法前 $m-1$ 步不中断, 则向量组 $\{v_k\}_{k=1}^m$ 和 $\{w_k\}_{k=1}^m$ 分别是子空间 $\mathcal{K}_m(A, r_0)$ 和 $\mathcal{K}_m(A^\top, \tilde{r}_0)$ 的一组基, 且

$$A V_m = V_m T_m + \gamma_m v_{m+1} e_m^\top,$$

$$A^\top W_m = W_m T_m^\top + \beta_m w_{m+1} e_m^\top,$$

$$W_m^\top A V_m = T_m.$$

 需要指出的是, 在通常情况下, $\{v_k\}_{k=1}^m$ 或 $\{w_k\}_{k=1}^m$ 本身并不相互正交.

注记

双正交化算法给出了构造 Krylov 子空间的一组基的另一种方法.

- ▶ 优点是可以利用三项递推公式, 从而能有效地节省运算量.
- ▶ 缺点是构造出来的基是非正交的, 而且方法更容易中断.

一个常用的补救措施就是所谓的 **look-ahead** 技术, 此时不要求 $W_m^T V_m = I$, 而只要求 $W_m^T V_m$ 是块对角矩阵, 从而尽可能地避免出现中断.

4-6-2 | BiCG 方法

BiCG, Bi-Conjugate Gradient

选取 $\mathcal{K}(A^\top, \tilde{r}_0)$ 作为约束空间

$$\text{find } \tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K}(A, r_0) \text{ such that } b - A\tilde{x} \perp \mathcal{K}(A^\top, \tilde{r}_0). \quad (4.52)$$

设 $x^{(k)} = x^{(0)} + V_k y_k$ 是 BiCG 方法在 $x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r_0)$ 中找到的近似解, 则

$$0 = W_k^\top (b - Ax^{(k)}) = W_k^\top (r_0 - AV_k y_k) = W_k^\top r_0 - W_k^\top A V_k y_k = \beta W_k^\top v_1 - T_k y_k.$$

因此, y_k 是下列三对角线性方程组的解

$$T_k y = \beta W_k^\top v_1 = \beta e_1 \rightarrow \text{采用 LU 分解求解}$$

算法 12 BiCG 方法

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$ 和 (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$
 - 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$ 和 $\beta = \|r_0\|_2$
 - 3: 选取向量 \tilde{r}_0 , 满足 $(r_0, \tilde{r}_0) \neq 0$ % 常用的选择是 $\tilde{r}_0 = r_0$
 - 4: 令 $p_1 = r_0, \tilde{p}_1 = \tilde{r}_0$
 - 5: **for** $k = 1, 2, \dots$ **do**
 - 6: $\alpha_k = (r_{k-1}, \tilde{r}_{k-1}) / (Ap_k, \tilde{p}_k)$
 - 7: $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k p_k$
 - 8: $r_k = r_{k-1} - \alpha_k Ap_k$
 - 9: **if** $\|r_k\|_2 / \beta < \varepsilon$ **then** % check convergence
 - 10: stop
 - 11: **end if**
 - 12: $\tilde{r}_k = \tilde{r}_{k-1} - \alpha_k A^T \tilde{p}_k$
 - 13: $\beta_k = (r_k, \tilde{r}_k) / (r_{k-1}, \tilde{r}_{k-1})$
 - 14: $p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k$
 - 15: $\tilde{p}_{k+1} = \tilde{r}_k + \beta_k \tilde{p}_k$
 - 16: **end for**
-

注记

- 如果 A 对称正定, 且 $\tilde{r}_0 = r_0$, 则 BiCG 方法就是 CG 方法.
- BiCG 可同时求解 $Ax = b$ 和 $A^T \tilde{x} = \tilde{b}$ (添加一条语言: $\tilde{x}^{(k)} = \tilde{x}^{(k-1)} + \alpha_k \tilde{p}_k$)
- 需要指出的是, 如果 T_k 不存在 LU 分解, 则 BiCG 方法就失效.
- 如果在方法收敛之前, 存在某个 k 使得 T_k 是奇异的, 则方法同样会失败.
- BiCG 是不稳定的, 同时, 由于不具备最优性质, 收敛曲线也不规则.

下面是 BiCG 方法的一个重要性质.

定理 设 r_k, \tilde{r}_k, p_k 和 \tilde{p}_k 是由 BiCG 方法所产生的, 则当 $i \neq j$ 时有

$$(r_i, \tilde{r}_j) = 0 \quad \text{和} \quad (Ap_i, \tilde{p}_j) = 0.$$

(留作练习)

4-6-3 | QMR 方法

QMR, Quasi-Minimal Residual

借鉴 GMRES 的思想, 将求解线性方程组 $T_k y = \beta e_1$ 改为求解最小二乘问题:

$$\min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r_0)} \|b - Ax\|_2. \quad (4.53)$$

这样就能保证残量的范数是递减的.

设 $x = x^{(0)} + V_k y$, 则

$$b - Ax = r_0 - AV_k y = \beta v_1 - V_{k+1} T_{k+1, k} y = V_{k+1} (\beta e_1 - T_{k+1, k} y).$$

于是 (4.53) 就转化为

$$\min_{y \in \mathbb{R}^k} \|V_{k+1} (\beta e_1 - T_{k+1, k} y)\|_2$$

与 GMRES 方法不同的是, 这里的 V_{k+1} 不是列正交的. 所以求解比较困难.

$$\|V_{k+1}(\beta e_1 - T_{k+1,k}y)\|_2 \leq \|V_{k+1}\|_2 \cdot \|\beta e_1 - T_{k+1,k}y\|_2,$$

因此我们可以通过极小化 $\|\beta e_1 - T_{k+1,k}y\|_2$ 来给出近似解. 这就是 **QMR 方法**

$$\text{find } \tilde{x} \in x^{(0)} + \mathcal{K}(A, r_0) \text{ such that } \|\beta e_1 - T_{k+1,k}\tilde{y}\|_2 = \min, \quad (4.54)$$

注记

- 需要注意的是, 在 QMR 方法中, 极小化的是**拟残量范数**.
- QMR 与 GMRES 非常类似, 只需将 Arnoldi 过程改为双正交化过程即可. 同时, 由于 $T_{k+1,k}$ 是三对角的, 因此最小二乘问题更容易求解.

4-7 | 免转置迭代方法

4.7 免转置迭代方法

4.7.1 CGS 方法

4.7.2 BiCGSTAB 方法

<https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/IMP>

在 BiCG 和 QMR 方法中, 都需要利用 A^T . 但在许多实际问题中, A^T 可能无法获得, 或者计算 A^T 与向量的乘积比较困难. 因此我们希望在计算过程中避免使用 A^T . 这就是 **免转置方法** (Transpose-Free Methods).

4-7-1 | CGS 方法

我们注意到, 当 BiCG 方法迭代 k 步后, 残量可表示为

$$r_k = \varphi_k(A)r_0, \quad (4.55)$$

其中 $\varphi_k \in \mathbb{P}_k$, 且 $\varphi_k(0) = 1$, 称为 **残量多项式**.

▶ 同时, 代表搜索方向的向量 p_{k+1} 可表示为

$$p_{k+1} = \psi_k(A)r_0, \quad \psi_k \in \mathbb{P}_k. \quad (4.56)$$

▶ 我们还注意到, 除了 A 与 A^T 的区别外, \tilde{r}_k 的更新公式与 r_k 的更新公式是一样的, 而 \tilde{p}_{k+1} 的更新公式则与 p_{k+1} 的更新公式是一样的, 即

$$\tilde{r}_k = \varphi_k(A^T)\tilde{r}_0, \quad \tilde{p}_{k+1} = \psi_k(A^T)\tilde{r}_0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (4.57)$$

► BiCG 中 α_k 和 β_k 的计算公式可改写为

$$\alpha_k = \frac{(r_{k-1}, \tilde{r}_{k-1})}{(Ap_k, \tilde{p}_k)} = \frac{(\varphi_{k-1}(A)r_0, \varphi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)}{(A\psi_{k-1}(A)r_0, \psi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)} = \frac{(\varphi_{k-1}^2(A)r_0, \tilde{r}_0)}{(A\psi_{k-1}^2(A)r_0, \tilde{r}_0)},$$

$$\beta_k = \frac{(r_k, \tilde{r}_k)}{(r_{k-1}, \tilde{r}_{k-1})} = \frac{(\varphi_k(A)r_0, \varphi_k(A^\top)\tilde{r}_0)}{(\varphi_{k-1}(A)r_0, \varphi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)} = \frac{(\varphi_k^2(A)r_0, \tilde{r}_0)}{(\varphi_{k-1}^2(A)r_0, \tilde{r}_0)}.$$

► 因此, 计算 α_k 和 β_k 时不再需要 A^\top .

但需要给出 $\varphi_k^2(A)r_0$ 和 $\psi_k^2(A)r_0$ 的 (递推) 计算方法.

$\varphi_k^2(A)r_0$ 和 $\psi_k^2(A)r_0$ 的递推算法

由 $r_k = r_{k-1} - \alpha_k A p_k$ 和 $p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k$ 可得

$$\varphi_k(A) = \varphi_{k-1}(A) - \alpha_k A \psi_{k-1}(A), \quad (4.58)$$

$$\psi_k(A) = \varphi_k(A) + \beta_k \psi_{k-1}(A), \quad k = 1, 2, \dots, \quad (4.59)$$

其中 $\varphi_0(A) = I$, $\psi_0(A) = I$.

两边平方可得

$$\varphi_k^2(A) = \varphi_{k-1}^2(A) + \alpha_k^2 A^2 \psi_{k-1}^2(A) - 2\alpha_k A \varphi_{k-1}(A) \psi_{k-1}(A),$$

$$\psi_k^2(A) = \varphi_k^2(A) + \beta_k^2 \psi_{k-1}^2(A) + 2\beta_k \varphi_k(A) \psi_{k-1}(A).$$

➤ 对于交叉项 $\varphi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A)$ 和 $\varphi_k(A)\psi_{k-1}(A)$, 我们有

$$\begin{aligned}\varphi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A) &= \varphi_{k-1}(A)(\varphi_{k-1}(A) + \beta_{k-1}\psi_{k-2}(A)) \\ &= \varphi_{k-1}^2(A) + \beta_{k-1}\varphi_{k-1}(A)\psi_{k-2}(A), \quad k = 2, 3, \dots\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\varphi_k(A)\psi_{k-1}(A) &= (\varphi_{k-1}(A) - \alpha_k A\psi_{k-1}(A))\psi_{k-1}(A) \\ &= \varphi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A) - \alpha_k A\psi_{k-1}^2(A) \\ &= \varphi_{k-1}^2(A) + \beta_{k-1}\varphi_{k-1}(A)\psi_{k-2}(A) - \alpha_k A\psi_{k-1}^2(A), \quad k = 2, 3, \dots\end{aligned}$$

► 所以, 我们有下面的递推关系式 (为了书写方便, 我们省去变量 A)

$$\begin{aligned}\varphi_1^2 &= (\varphi_0 - \alpha_1 A \psi_0)^2 = (I - \alpha_1 A)^2, \\ \varphi_1 \psi_0 &= \varphi_1 = I - \alpha_1 A, \\ \psi_1^2 &= (\varphi_1 + \beta_1 \psi_0)^2 = (\varphi_1 + \beta_1 I)^2,\end{aligned}\tag{4.60}$$

和

$$\begin{aligned}\varphi_k^2 &= \varphi_{k-1}^2 + \alpha_k^2 A^2 \psi_{k-1}^2 - 2\alpha_k A(\varphi_{k-1}^2 + \beta_{k-1} \varphi_{k-1} \psi_{k-2}), \\ \varphi_k \psi_{k-1} &= \varphi_{k-1}^2 + \beta_{k-1} \varphi_{k-1} \psi_{k-2} - \alpha_k A \psi_{k-1}^2, \\ \psi_k^2 &= \varphi_k^2 + \beta_k^2 \psi_{k-1}^2 + 2\beta_k \varphi_k \psi_{k-1},\end{aligned}\tag{4.61}$$

$k = 2, 3, \dots$

记 $\hat{r}_k = \varphi_k^2(A)r_0$, $\hat{p}_{k+1} = \psi_k^2(A)r_0$, $\hat{q}_k = \varphi_k(A)\psi_{k-1}(A)r_0$, 则

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{r}_k = \hat{r}_{k-1} + \alpha_k^2 A^2 \hat{p}_k - 2\alpha_k A(\hat{r}_{k-1} + \beta_{k-1} \hat{q}_{k-1}) \\ \quad = \hat{r}_{k-1} + \alpha_k A(\alpha_k A \hat{p}_k - 2\hat{r}_{k-1} - 2\beta_{k-1} \hat{q}_{k-1}), \\ \hat{q}_k = \hat{r}_{k-1} + \beta_{k-1} \hat{q}_{k-1} - \alpha_k A \hat{p}_k, \\ \hat{p}_{k+1} = \hat{r}_k + \beta_k^2 \hat{p}_k + 2\beta_k \hat{q}_k, \end{array} \right. \quad k = 1, 2, \dots,$$

其中 $\hat{r}_0 = r_0$, $\hat{p}_1 = r_0$, $\hat{q}_0 = 0$, $\beta_0 = 0$,

$$\alpha_k = \frac{(\varphi_{k-1}^2(A)r_0, \tilde{r}_0)}{(A\psi_{k-1}^2(A)r_0, \tilde{r}_0)} = \frac{(\hat{r}_{k-1}, \tilde{r}_0)}{(A\hat{p}_k, \tilde{r}_0)},$$

$$\beta_k = \frac{(\varphi_k^2(A)r_0, \tilde{r}_0)}{(\varphi_{k-1}^2(A)r_0, \tilde{r}_0)} = \frac{(\hat{r}_k, \tilde{r}_0)}{(\hat{r}_{k-1}, \tilde{r}_0)}.$$

$k = 1, 2, \dots$

➤ 为了简化计算, 我们引入辅助变量 $u_k \triangleq \hat{r}_k + \beta_k \hat{q}_k$. 于是迭代公式变为

$$\begin{cases} \hat{q}_k = u_{k-1} - \alpha_k A \hat{p}_k, \\ \hat{r}_k = \hat{r}_{k-1} + \alpha_k A (\alpha_k A \hat{p}_k - 2u_{k-1}) \\ \quad = \hat{r}_{k-1} - \alpha_k A (\hat{q}_k + u_{k-1}), \\ \hat{p}_{k+1} = u_k + \beta_k^2 \hat{p}_k + \beta_k \hat{q}_k. \end{cases} \quad k = 1, 2, \dots \quad (4.62)$$

CGS 算法

由于 $\hat{r}_k = \varphi_k^2(A)r_0$, 如果 BiCG 方法收敛, 即 $\|r_k\| = \|\varphi_k(A)r_0\|$ 趋向于 0 (对任意初始向量都成立), 则 $\|\hat{r}_k\| = \|\varphi_k^2(A)r_0\|$ 也趋向于 0, 而且速度可能会更快.

因此, 我们将 \hat{r}_k 对应的向量 $x^{(k)}$ 作为近似解, 即 $x^{(k)}$ 满足

$$\hat{r}_k = b - Ax^{(k)}.$$

由 (4.62) 可以直接得到 $x^{(k)}$ 的递推公式

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k(\hat{q}_k + u_{k-1}), \quad k = 1, 2, \dots$$

将上面的迭代公式整理后即得 **CGS 方法** (Conjugate Gradient Squared)

算法 13 CGS 方法

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$ 和 (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$
 - 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$, 令 $\hat{p}_1 = r_0$, $\hat{r}_0 = r_0$, $u_0 = r_0$
 - 3: 选取 \tilde{r}_0 满足 $(r_0, \tilde{r}_0) \neq 0$ % one common choice is $\tilde{r}_0 = r_0$
 - 4: **for** $k = 1, 2, \dots$ **do**
 - 5: $\alpha_k = (\hat{r}_{k-1}, \tilde{r}_0) / (A\hat{p}_k, \tilde{r}_0)$
 - 6: $\hat{q}_k = u_{k-1} - \alpha_k A\hat{p}_k$
 - 7: $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k(\hat{q}_k + u_{k-1})$
 - 8: $\hat{r}_k = \hat{r}_{k-1} - \alpha_k A(\hat{q}_k + u_{k-1})$
 - 9: **if** $\|\hat{r}_k\|_2 < \varepsilon$ **then** % check convergence
 - 10: stop
 - 11: **end if**
 - 12: $\beta_k = (\hat{r}_k, \tilde{r}_0) / (\hat{r}_{k-1}, \tilde{r}_0)$
 - 13: $u_k = \hat{r}_k + \beta_k \hat{q}_k$
 - 14: $\hat{p}_{k+1} = u_k + \beta_k^2 \hat{p}_k + \beta_k \hat{q}_k$
 - 15: **end for**
-

注记

- 在 CGS 方法中, 需要计算两次矩阵向量乘积, 因此每个迭代步的运算量与 BiCG 方法大致相同, 但这里不再需要 A^T .
- 由于 CGS 方法的残量多项式是 BiCG 方法残量多项式的平方, 因此 CGS 方法的收敛速度大约是 BiCG 的两倍. 但我们知道, 即使 BiCG 方法收敛, 其残量的范数也不一定是递减的. 因此, 如果在某个迭代步, BiCG 方法的残量范数变大, 则 CGS 方法的残量范数也可能会变大, 而且增幅会更大. 因此, CGS 方法的收敛曲线可能会出现非常剧烈的震荡. 这很可能会导致方法的不稳定.

4-7-2 | BiCGSTAB 方法

为了克服 CGS 方法可能会出现的剧烈震荡, van der Vorst 提出了 **BiCGSTAB** 方法 (Bi-Conjugate Gradient Stabilized). 其基本想法是将残量表示为

$$r_k = \phi_k(A)\varphi_k(A)r_0, \quad k = 1, 2, \dots,$$

其中 φ_k 是 BiCG 方法的残量多项式, 而 ϕ_k 则是一个新的 k 次多项式, 用来修正残量范数的震荡现象.

 如果取 $\phi_k = \varphi_k$, 则 BiCGSTAB 就是 CGS.

ϕ_k 的选取

在 BiCGSTAB 方法中, 多项式 ϕ_k 是通过下面的递推方法来定义的

$$\phi_0(A) = I, \quad \phi_k(A) = (I - \omega_k A)\phi_{k-1}(A), \quad k = 1, 2, \dots,$$

其中 ω_k 是待定系数, 用来极小化残量范数.

► 于是, 残量和搜索方向可定义为

$$r_k = \phi_k(A)\varphi_k(A)r_0, \quad p_{k+1} = \phi_k(A)\psi_k(A)r_0, \quad k = 1, 2, \dots,$$

r_k 和 p_k 的递推公式

$$\varphi_k(A) = \varphi_{k-1}(A) - \alpha_k A \psi_{k-1}(A),$$

$$\psi_k(A) = \varphi_k(A) + \beta_k \psi_{k-1}(A), \quad k = 1, 2, \dots,$$

由 $\phi_k(A)$ 的递推公式和

可知

$$\phi_k(A)\varphi_k(A) = (I - \omega_k A) \left(\phi_{k-1}(A)\varphi_{k-1}(A) - \alpha_k A \phi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A) \right)$$

$$\phi_k(A)\psi_k(A) = \phi_k(A)\varphi_k(A) + \beta_k (I - \omega_k A)\phi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A).$$

所以

$$\begin{aligned} r_k &= \phi_k(A)\varphi_k(A)r_0 = (I - \omega_k A)(\phi_{k-1}(A)\varphi_{k-1}(A)r_0 - \alpha_k A \phi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A)r_0) \\ &= (I - \omega_k A)(r_{k-1} - \alpha_k A p_k), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_{k+1} &= \phi_k(A)\psi_k(A)r_0 = \phi_k(A)\varphi_k(A)r_0 + \beta_k (I - \omega_k A)\phi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A)r_0 \\ &= r_k + \beta_k (I - \omega_k A)p_k. \end{aligned}$$

参数 α_k 和 β_k 仍然定义为

$$\alpha_k = \frac{(r_{k-1}, \tilde{r}_{k-1})}{(Ap_k, \tilde{p}_k)} = \frac{(\varphi_{k-1}(A)r_0, \varphi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)}{(A\psi_{k-1}(A)r_0, \psi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)} = \frac{(\varphi_{k-1}^2(A)r_0, \tilde{r}_0)}{(A\psi_{k-1}^2(A)r_0, \tilde{r}_0)}$$
$$\beta_k = \frac{(r_k, \tilde{r}_k)}{(r_{k-1}, \tilde{r}_{k-1})} = \frac{(\varphi_k(A)r_0, \varphi_k(A^\top)\tilde{r}_0)}{(\varphi_{k-1}(A)r_0, \varphi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)} = \frac{(\varphi_k^2(A)r_0, \tilde{r}_0)}{(\varphi_{k-1}^2(A)r_0, \tilde{r}_0)}.$$

由于我们不再计算 $\varphi_k^2(A)$ 或 $\psi_k^2(A)$, 因此, 需要寻找 **其它方式** 计算 α_k 和 β_k .

 又 $\varphi_i(A)r_0$ 和 $\varphi_i(A^\top)\tilde{r}_0$ 是 BiCG 的残量, 由 BiCG 性质可知

$$(\varphi_i(A)r_0, \varphi_j(A^\top)\tilde{r}_0) = 0, \quad \text{for } i > j,$$

即

$$(\varphi_i(A)r_0, (A^\top)^j \tilde{r}_0) = 0, \quad \text{for } i > j.$$


因此, 在计算 $(\varphi_{k-1}(A)r_0, \varphi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)$ 时, 只需考虑 $\varphi_{k-1}(A^\top)$ 的最高次项.

$$\varphi_k(A) = \varphi_{k-1}(A) - \alpha_k A \psi_{k-1}(A),$$

由 $\psi_k(A) = \varphi_k(A) + \beta_k \psi_{k-1}(A), \quad k = 1, 2, \dots,$ 可知

$$\begin{aligned}\varphi_k(A^\top) &= \varphi_{k-1}(A^\top) - \alpha_k A^\top \psi_{k-1}(A^\top) \\ &= \varphi_{k-1}(A^\top) - \alpha_k A^\top (\varphi_{k-1}(A^\top) + \beta_k \psi_{k-2}(A^\top)) \\ &= -\alpha_k A^\top \varphi_{k-1}(A^\top) + \varphi_{k-1}(A^\top) - \alpha_k \beta_k A^\top \psi_{k-2}(A^\top).\end{aligned}$$

因此, $\varphi_k(A^\top)$ 的最高次项的系数与 $-\alpha_k A^\top \varphi_{k-1}(A^\top)$ 的最高次项的系数是相等的.

 由于 $\varphi_0(A^\top) = I$, 所以 $-\alpha_k A^\top \varphi_{k-1}(A^\top)$ 的最高次项系数为 $(-1)^k \alpha_k \alpha_{k-1} \cdots \alpha_1$
所以

$$\left(\varphi_{k-1}(A) r_0, \varphi_{k-1}(A^\top) \tilde{r}_0 \right) = (-1)^{k-1} \alpha_{k-1} \cdots \alpha_1 \left(\varphi_{k-1}(A) r_0, (A^\top)^{k-1} \tilde{r}_0 \right)$$

另一方面, 由 $\phi_k(A)$ 的递推公式可知 $\phi_{k-1}(A^\top)$ 的最高次项是

$$(-1)^{k-1}\omega_{k-1}\omega_{k-2}\cdots\omega_1(A^\top)^{k-1}.$$

所以

$$\left(\varphi_{k-1}(A)r_0, \phi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0\right) = (-1)^{k-1}\omega_{k-1}\omega_{k-2}\cdots\omega_1\left(\varphi_{k-1}(A)r_0, (A^\top)^{k-1}\tilde{r}_0\right).$$



因此, 我们可以得到下面的等式

$$\frac{\left(\varphi_{k-1}(A)r_0, \varphi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0\right)}{\left(\varphi_{k-1}(A)r_0, \phi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0\right)} = \frac{\alpha_{k-1}\alpha_{k-2}\cdots\alpha_1}{\omega_{k-1}\omega_{k-2}\cdots\omega_1}, \quad k = 1, 2, \dots,$$

也就是说, 我们可以通过 $\left(\varphi_k(A)r_0, \phi_k(A^\top)\tilde{r}_0\right)$ 来计算 $\left(\varphi_k(A)r_0, \varphi_k(A^\top)\tilde{r}_0\right)$.

下面考虑如何计算 $(A\psi_{k-1}(A)r_0, \psi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)$.

由 $\psi_k(A) = \varphi_k(A) + \beta_k\psi_{k-1}(A)$ 可知, $\psi_k(A^\top)$ 的最高次项与 $\varphi_k(A^\top)$ 相同.

根据 BiCG 的性质, 我们有

$$(A\psi_i(A)r_0, \psi_j(A^\top)\tilde{r}_0) = 0, \quad \text{for } i > j,$$

即

$$(A\psi_i(A)r_0, (A^\top)^j\tilde{r}_0) = 0, \quad \text{for } i > j.$$

所以计算 $(A\psi_{k-1}(A)r_0, \psi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)$ 时只需考虑 $\psi_{k-1}(A^\top)$ 的最高次项, 即

$$(A\psi_{k-1}(A)r_0, \psi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0) = (-1)^{k-1}\alpha_{k-1}\alpha_{k-2}\cdots\alpha_1(A\psi_{k-1}(A)r_0, (A^\top)^{k-1}\tilde{r}_0)$$

相类似地, 我们有

$$\left(A\psi_{k-1}(A)r_0, \phi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0 \right) = (-1)^{k-1}\omega_{k-1}\omega_{k-2}\cdots\omega_1 \left(A\psi_{k-1}(A)r_0, (A^\top)^{k-1}\tilde{r}_0 \right)$$

因此

$$\frac{(A\psi_{k-1}(A)r_0, \psi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)}{(A\psi_{k-1}(A)r_0, \phi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)} = \frac{\alpha_{k-1}\alpha_{k-2}\cdots\alpha_1}{\omega_{k-1}\omega_{k-2}\cdots\omega_1}, \quad k = 1, 2, \dots$$

所以

$$\begin{aligned}\alpha_k &= \frac{(\varphi_{k-1}(A)r_0, \varphi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)}{(A\psi_{k-1}(A)r_0, \psi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)} = \frac{(\varphi_{k-1}(A)r_0, \phi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)}{(A\psi_{k-1}(A)r_0, \phi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)} \\ &= \frac{(\phi_{k-1}(A)\varphi_{k-1}(A)r_0, \tilde{r}_0)}{(A\phi_{k-1}(A)\psi_{k-1}(A)r_0, \tilde{r}_0)} = \frac{(r_{k-1}, \tilde{r}_0)}{(Ap_k, \tilde{r}_0)},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\beta_k &= \frac{(\varphi_k(A)r_0, \varphi_k(A^\top)\tilde{r}_0)}{(\varphi_{k-1}(A)r_0, \varphi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)} = \frac{\alpha_k}{\omega_k} \cdot \frac{(\varphi_k(A)r_0, \phi_k(A^\top)\tilde{r}_0)}{(\varphi_{k-1}(A)r_0, \phi_{k-1}(A^\top)\tilde{r}_0)} \\ &= \frac{\alpha_k}{\omega_k} \cdot \frac{(\phi_k(A)\varphi_k(A)r_0, \tilde{r}_0)}{(\phi_{k-1}(A)\varphi_{k-1}(A)r_0, \tilde{r}_0)} = \frac{\alpha_k}{\omega_k} \cdot \frac{(r_k, \tilde{r}_0)}{(r_{k-1}, \tilde{r}_0)}.\end{aligned}$$

整理后可得

$$\begin{cases} r_k = (I - \omega_k A)(r_{k-1} - \alpha_k Ap_k) & \text{with } \alpha_k = \frac{(r_{k-1}, \tilde{r}_0)}{(Ap_k, \tilde{r}_0)}, \\ p_{k+1} = r_k + \beta_k(I - \omega_k A)p_k & \text{with } \beta_k = \frac{\alpha_k}{\omega_k} \cdot \frac{(r_k, \tilde{r}_0)}{(r_{k-1}, \tilde{r}_0)}, \end{cases} \quad k = 1, 2, \dots,$$

其中 $p_1 = r_0$.

近似解 $x^{(k)}$ 的更新公式

由表达式 $r_k = (I - \omega_k A)(r_{k-1} - \alpha_k A p_k)$ 可知

$$\begin{aligned} b - Ax^{(k)} &= r_k = (I - \omega_k A)(r_{k-1} - \alpha_k A p_k) \\ &= r_{k-1} - \alpha_k A p_k - \omega_k A(r_{k-1} - \alpha_k A p_k) \\ &= b - Ax^{(k-1)} - \alpha_k A p_k - \omega_k A(r_{k-1} - \alpha_k A p_k), \end{aligned}$$

因此

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k p_k + \omega_k (r_{k-1} - \alpha_k A p_k)$$

参数 ω_k 的选取

前面已经提到, 参数 ω_k 的选取准则是极小化残量范数 $\|r_k\|_2$, 即

$$\omega_k = \arg \min_{\omega} \|(I - \omega A)(r_{k-1} - \alpha_k A p_k)\|_2.$$

记

$$q_k \triangleq r_{k-1} - \alpha_k A p_k.$$

则上述最小二乘问题的解为

$$\omega_k = \frac{(q_k, A q_k)}{(A q_k, A q_k)}$$

算法 14 BiCGSTAB 算法

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$ 和 (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$
 - 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$
 - 3: 选取 \tilde{r}_0 满足 $(r_0, \tilde{r}_0) \neq 0$ % one common choice is $\tilde{r}_0 = r_0$
 - 4: 令 $p_1 = r_0$
 - 5: **for** $k = 1, 2, \dots$ **do**
 - 6: $\alpha_k = (r_{k-1}, \tilde{r}_0) / (Ap_k, \tilde{r}_0)$ % if $(r_{k-1}, \tilde{r}_0) = 0$ or $(Ap_k, \tilde{r}_0) = 0$, then breakdown
 - 7: $q_k = r_{k-1} - \alpha_k Ap_k$
 - 8: $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k p_k$ % if $\|q_k\| < \varepsilon$, then converged and stop
 - 9: $\omega_k = (q_k, Aq_k) / (Aq_k, Aq_k)$ % if $\omega_k = 0$, then breakdown
 - 10: $x^{(k)} = x^{(k)} + \omega_k q_k$
 - 11: $r_k = q_k - \omega_k Aq_k$
 - 12: **if** $\|r_k\|_2 < \varepsilon$, **then stop, end if** % check convergence
 - 13: $\beta_k = \alpha_k / \omega_k \cdot (r_k, \tilde{r}_0) / (r_{k-1}, \tilde{r}_0)$
 - 14: $p_{k+1} = r_k + \beta_k (p_k - \omega_k Ap_k)$
 - 15: **end for**
-

注记

Bi-CGSTAB 是当前常用的求解非对称线性方程组的方法之一,但在某些情况下效率较低,比如那种系数矩阵的特征值虚部占优时的情形,这种方程通常来自于那些对流项占优的偏微分方程.此时可以考虑 BiCGStab2 或 BiCGstab(ℓ).

4-8

正规方程的迭代方法


4.8 正规方程的迭代方法

4.8.1 CGLS 方法和 CGNE 方法

4.8.2 LSQR 方法

<https://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/IMP>

求解非对称线性方程组的另外一种选择: 用 CG 求解正规方程.

 **缺点:** 条件数是原问题的平方, 不适合病态问题.

 **优点:** 在某些场合, 这种方法很有吸引力, 比如 A 具有非常聚集的奇异值.

4-8-1 | CGLS 方法和 CGNE 方法

$$Ax = b$$

$$\iff$$

$$A^T Ax = A^T b$$

用 CG 方法求解上述正规方程, 就得到 **CGLS 方法** (CG for Least Squares problem)

将 CG 方法直接用于求解正规方程是不可取的, 需要对执行过程稍作修改.

下面给出 CGLS 方法的算法描述, 主要是利用了中间变量 Ap_k , 避免了直接计算 $A^T Ap_k$, 具体推导过程留作练习.

算法 15 CGLS 方法

- 1: 给定初值 $x^{(0)}$, (相对) 精度要求 $\varepsilon > 0$ 和最大迭代步数 IterMax
 - 2: 计算 $r_0 = b - Ax^{(0)}$ 和 $\beta = \|r_0\|_2$
 - 3: $p_1 = A^\top r_0$
 - 4: **for** $k = 1$ to IterMax **do**
 - 5: $\alpha_k = (A^\top r_{k-1}, A^\top r_{k-1}) / (Ap_k, Ap_k)$
 - 6: $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k p_k$
 - 7: $r_k = r_{k-1} - \alpha_k Ap_k$
 - 8: relres = $\|r_k\|_2 / \beta$
 - 9: **if** relres $< \varepsilon$ **then**
 - 10: break
 - 11: **end if**
 - 12: $\beta_k = (A^\top r_k, A^\top r_k) / (A^\top r_{k-1}, A^\top r_{k-1})$
 - 13: $p_{k+1} = A^\top r_k + \beta_k p_k$
 - 14: **end for**
-

注记

需要指出的是, 方法中的 r_k 就是原方程组 $Ax = b$ 的残量, 而不是正规方程的残量, 即 $r_k = b - Ax^{(k)}$. 这给判断方法是否收敛带来了很大的方便.

根据 CG 方法的最优性质可知, 由 CGLS 方法得到的近似解 $x^{(k)}$ 在仿射空间 $x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A^T A, A^T r_0)$ 中极小化残量 $b - Ax$ 的 2-范数.

定理 设 $x^{(k)}$ 是由 CGLS 方法迭代 k 步后得到的近似解, 则

$$\|b - Ax^{(k)}\|_2 = \min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A^T A, A^T r_0)} \|b - Ax\|_2.$$

(留作练习)

将原方程组转化为正规方程的另一种方法是引入辅助变量 y , 即令 $x = A^T y$, 则

$$AA^T y = b.$$

将 CG 方法用于求解上述正规方程, 就可以得到一个与 CGLS 类似的方法, 称为 **CGNE 方法** 或 **Craig 方法**. 该方法的具体推导过程与算法描述留作练习.

类似地, 我们有下面的最优性质.

定理 设 $x^{(k)}$ 是由 Craig 方法迭代 k 步后得到的近似解, 则

$$\|x^{(k)} - x_*\|_2 = \min_{x \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A^T A, A^T r_0)} \|x - x_*\|_2,$$

其中 x_* 表示精确解.

(留作练习)

注记

- 根据 CGLS 和 CGNE 的最优性质, 我们有趣地发现, CGLS 方法和 CGNE 方法都是在同一个仿射空间寻找近似解, 但找到的却是具有不同的最优性质的近似解.
- 需要指出的是, 上面两个方法也可以用于求解超定或欠的定线性方程组, 即线性最小二乘问题.


4-8-2 | LSQR 方法

- 📄 如果系数矩阵条件数比较大, 则不建议求解正规方程, 可以考虑使用 **LSQR 方法**.
- 📄 事实上, LSQR 方法与 CGLS 是等价的. 但对于坏条件问题, LSQR 具有更好的数值表现, 特别是那些解与对应于最小奇异值的奇异向量密切相关的问题.


等价鞍点问题

$$Ax = b \iff \begin{bmatrix} I & A \\ A^\top & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{记为} \quad \mathcal{A}f = g,$$

其中 $r = b - Ax$. 选取初值 $[0, 0]^\top$, 用 Lanczos 算法构造 $\mathcal{K}(\mathcal{A}, g)$ 的一组标准正交基.

 通过直接计算可知


$$v_1 = \frac{1}{\|b\|_2} \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}, \quad v_2 = \frac{1}{\|A^\top b\|_2} \begin{bmatrix} 0 \\ A^\top b \end{bmatrix}.$$

 依次类推, 我们可以发现这样一个规律: 基向量 v_{2k-1} 和 v_{2k} 分别具有下面的形式

$$v_{2k-1} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{和} \quad v_{2k} = \begin{bmatrix} 0 \\ * \end{bmatrix}.$$

因此, 我们引入另外两组单位向量 $\{u_k\}$ 和 $\{w_k\}$ 来表示这组基, 即


$$v_{2k-1} = \begin{bmatrix} u_k \\ 0 \end{bmatrix}, \quad v_{2k} = \begin{bmatrix} 0 \\ w_k \end{bmatrix}, \quad k = 1, 2, \dots$$

 记 $\beta = \|b\|_2$, 则鞍点问题的 Lanczos 过程可描述为:

$$\beta u_1 = b, \quad \alpha_1 w_1 = A^\top u_1, \quad \begin{cases} \beta_k u_{k+1} = Aw_k - \alpha_k u_k, \\ \alpha_{k+1} w_{k+1} = A^\top u_{k+1} - \beta_k w_k, \end{cases} \quad k = 1, 2, \dots,$$

其中 $\beta_k > 0$ 和 $\alpha_{k+1} > 0$ 的选取是确保 $\|u_{k+1}\|_2 = \|w_{k+1}\|_2 = 1$, 即

$$\beta_k = \|Aw_k - \alpha_k u_k\|_2, \quad \alpha_{k+1} = \|A^\top u_{k+1} - \beta_k w_k\|_2.$$

 需要指出的是, 这里的 α_k 和 β_k 与一般 Lanczos 过程中的 α_k 和 β_k 是不一样的.

 上面的这个过程实际上就是一个 **双对角化** (bidiagonalization) 过程.

记 $U_m = [u_1, u_2, \dots, u_m]$, $W_m = [w_1, w_2, \dots, w_m]$, 则有

$$AW_m = U_{m+1}\tilde{B}_m, \quad (4.63)$$

$$A^T U_{m+1} = W_m \tilde{B}_m^T + \alpha_m w_m e_{m+1}^T,$$

其中 $e_{m+1} = [0, \dots, 0, 1]^T \in \mathbb{R}^{m+1}$, $\tilde{B}_m = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & & \\ \beta_1 & \ddots & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \alpha_m & \\ & & & & & \beta_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+1) \times m}$,

且 $U_{m+1}^T U_{m+1} = I_{m+1}$, $W_m^T W_m = I_m$. 所以, 矩阵

$$\begin{bmatrix} u_1 & 0 & u_2 & 0 & \cdots & 0 & u_m \\ 0 & w_1 & 0 & w_2 & \cdots & w_{m-1} & 0 \end{bmatrix} \quad \text{或} \quad \begin{bmatrix} U_{m+1} & 0 \\ 0 & W_m \end{bmatrix}$$

的列向量组构成了 $\mathcal{K}_{2m+1}(\mathcal{A}, g_0)$ 的一组基.

LSQR 数值求解

在 $\mathcal{K}_{2m+1}(\mathcal{A}, g_0)$ 中寻找近似解, 使得原方程组的残量范数 $\|b - A\tilde{x}\|_2$ 达到最小.

设近似解为 $[\tilde{x}, \tilde{r}]^\top$, 可写成

$$\begin{bmatrix} \tilde{r} \\ \tilde{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_{m+1} & 0 \\ 0 & W_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{m+1} \\ y_m \end{bmatrix} \quad \text{或者} \quad \begin{cases} \tilde{r} = U_{m+1} t_{m+1}, \\ \tilde{x} = W_m y_m. \end{cases}$$

由 (4.63) 可知

$$\begin{aligned} b - A\tilde{x} &= \beta u_1 - AW_m y_m \\ &= U_{m+1}(\beta e_1) - U_{m+1} \tilde{B}_m y_m \\ &= U_{m+1}(\beta e_1 - \tilde{B}_m y_m). \end{aligned}$$

设 T_m 是 Lanczos 算法作用到正规方程 $A^\top Ax = A^\top b$ 上得到的对称三对角矩阵, 则可以证明: \tilde{B}_m 就是 T_m 的双对角化因子, 即 $T_m = \tilde{B}_m^\top \tilde{B}_m$. (证明留作练习)

由于 $U_{m+1}^\top U_{m+1} = I_{m+1}$, 因此

$$\|b - A\tilde{x}\|_2 = \|U_{m+1}(\beta e_1 - \tilde{B}_m y_m)\|_2 = \|\beta e_1 - \tilde{B}_m y_m\|_2.$$

所以, 极小化残量范数就等价于求解下面的最小二乘问题:

$$\min_{y \in \mathbb{R}^m} \|\beta e_1 - \tilde{B}_m y\|_2.$$

我们可以采用 QR 分解来求解该问题. 这就形成了完整的 LSQR 方法.

注记

相比于正规方程的 CG 方法, LSQR 方法具有更好的稳定性. 原因在于 LSQR 方法采用了双对角化过程, 而且最后是用 QR 分解来求解最小二乘问题. 因此对于坏条件问题, 可以有效地控制舍入误差的增长.

谢谢
THANK YOU

