

基于 Lanczos 双 A - 正交的一种修正的 QMR 算法

张晋^a, 李春光^b, 景何仿^b

(北方民族大学 a. 数学与信息科学学院; b. 数值计算与工程应用研究所, 宁夏 银川 750021)

摘要: 本文研究了基于 Lanczos 双正交过程的拟极小残量法 (QMR). 将 QMR 算法中的 Lanczos 双正交过程用 Lanczos 双 A - 正交过程代替, 利用该算法得到的近似解与最后一个基向量的线性组合来作为新的近似解, 使新近似解的残差范数满足一个一维极小化问题, 从而得到一种基于 Lanczos 双 A - 正交的修正的 QMR 算法. 数值试验表明, 对于某些大型线性稀疏方程组, 新算法比 QMR 算法收敛快得多.

关键词: Krylov 子空间方法; 双 A - 正交过程; 线性方程组

MR(2010) 主题分类号: 65F10

中图分类号: O241.6

文献标识码: A

文章编号: 0255-7797(2016)04-0767-08

1 引言

对于大规模稀疏线性方程组 $Ax = b$, 其中 $A \in R^{n \times n}$ 是非奇异且稀疏的, $x, b \in R^n$ 为 n 维列向量, 该方程组的求解常使用迭代法, 而在众多的迭代法当中, Krylov 子空间方法是当前应用最为广泛的方法. Krylov 子空间方法主要基于两类过程来产生 Krylov 子空间基, 一类是基于 Arnoldi 过程构造 Krylov 子空间的正交基的方法, 如 GMRES^[1] 方法, FOM^[1] 方法等, 这类算法的研究也是目前研究的热点, 如文献 [3] 基于文献 [2] 提出一种修正的 GMRES 方法, 提高了 GMRES 方法的收敛速度; 另一类是基于 Lanczos 双正交过程产生的 Krylov 子空间的算法, 如 QMR^[4], BiCG^[1] 等方法, 文献 [5] 中提出一种 Lanczos 双 A - 正交过程, 数值试验表明该过程能够有效减少迭代过程中的存储量. 本文将文献 [5] 中提到的用 Lanczos 双 A - 正交过程来产生的 Krylov 子空间基应用到 QMR 方法中, 同时结合文献 [2] 和 [3] 中的思想对该方法予以修正, 得到一种基于 Lanczos 双 A - 正交的修正的 QMR 算法, 旨在加快 QMR 方法收敛速度的同时减少迭代过程中的存储量. 数值试验表明新算法在这些方面是优于 QMR 方法的.

2 非对称的 Lanczos 双 A - 正交过程

对于两个实向量 $x, y \in R^n$, 它们的标准内积记为如下形式

$$\langle x, y \rangle = x^T y = \sum_{i=1}^n x_i y_i,$$

*收稿日期: 2013-12-08 接收日期: 2014-09-10

基金项目: 国家自然科学基金重大研究计划培育项目 (91230111); 国家自然科学基金项目 (11361002); 北方民族大学院级项目 (2012xjyk09).

作者简介: 张晋 (1987-), 女, 山西晋城, 硕士, 主要研究方向: 数值代数.

通讯作者: 李春光.

T_m 中的元素是迭代过程产生的, 其中 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$ 是复的, $\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_m$ 是正的, Lanczos 双 A - 正交过程满足如下关系

$$\begin{aligned} AV_m &= V_m T_m + \delta_{m+1} \nu_{m+1} e_m^T, \\ A^T W_m &= W_m T_m^T + \beta_{m+1} \omega_{m+1} e_m^T, \\ W_m^T AV_m &= I_m, \\ W_m^T A^2 V_m &= T_m. \end{aligned}$$

3 基于 Lanczos 双 A - 正交的一种修正的 QMR 算法

3.1 基于 Lanczos 双 A - 正交的 QMR 算法 (QMRA)

根据 Lanczos 双 A - 正交过程有

$$AV_m = V_{m+1} \bar{T}_m,$$

其中 \bar{T}_m 是的三对角矩阵, 如果 ν_1 是由 r_0 的倍数定义的, 如 $\nu_1 = \beta r_0$, 那么原方程组具有以下形式的近似解

$$x_m = x_0 + V_m y,$$

该近似解的残差向量可以表示为

$$\begin{aligned} b - Ax_m &= b - A(x_0 + V_m y) = r_0 - AV_m y \\ &= \beta \nu_1 - V_{m+1} \bar{T}_m y = V_{m+1} (\beta e_1 - \bar{T}_m y), \end{aligned}$$

残差向量的范数为 $\|b - x_m\|_2 = \|V_{m+1}(\beta e_1 - \bar{T}_m y)\|_2$.

如果 V_{m+1} 的列向量是正交的, 那么 $\|b - x_m\|_2 = \|\beta e_1 - \bar{T}_m y\|_2$, 但在 Lanczos 双 A - 正交过程中 ν_i 不是正交的, 但通过极小化函数 $F(y) = \|\beta e_1 - \bar{T}_m y\|_2$ 得到 y 也是可取的, 从而得到相应的近似解为 $x_m = x_0 + V_m y$, 为了和原始的 QMR 方法加以区别, 将这种算法记为 QMRA. 具体算法如下:

算法 2 (基于 Lanczos 双 A - 正交的 QMR 算法)

1. 给定 x_0 , 计算 $r_0 = b - Ax_0$, 令 $\beta = \|r_0\|_2$;
2. 令 $\nu_1 = r_0/\beta$, 选取 ω_1 , 使得 $\langle \omega_1, A\nu_1 \rangle = 1$, 比如 $(\omega_1 = \frac{A\nu_1}{\|A\nu_1\|_2^2})$;
3. 执行算法 1 到 m 步, 得到 $V_m = [\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_m]$ 和 $W_m = [\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_m]$ 以及三对角矩阵 \bar{T}_m ;
4. 对 \bar{T}_m 进行一系列的 Givens 变换 $\Omega_m, \Omega_{m-1}, \dots, \Omega_1$, 得到

$$(\Omega_m \Omega_{m-1} \cdots \Omega_1) \bar{T}_m = \begin{pmatrix} R_{m,m} \\ 0 \end{pmatrix};$$

5. 计算 $x_m = x_0 + P_m g_m$, 其中 $P_m = V_m R_{m,m}^{-1}$, g_m 为

$$g_{m+1,m} = (\Omega_m \Omega_{m-1} \cdots \Omega_1 \beta e_1) = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{m+1})^T,$$

当矩阵阶数 $n = 1500$, 求解精度为 $Tol = 1e - 8$ 时, 三种方法得到迭代收敛效果如图 1, 由于该矩阵伪谱的凸包中含有零点, 在这种情况下 GMRES 或其他一些混合算法将导致失败, 但图中可以看出新算法具有满意的收敛效果.

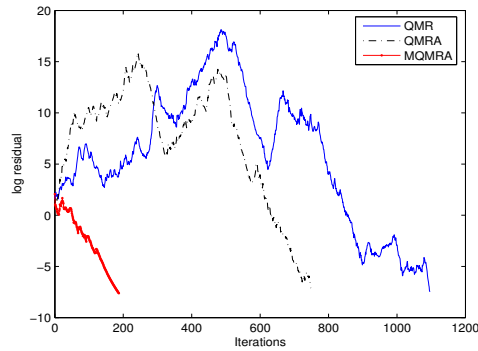


图 1: 算例 1 的数值结果

算例 2 本算例中的系数矩阵取自文献 [3], 具有如下形式:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & & \alpha \\ & 2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & n-1 & \\ & & & & n \end{pmatrix}.$$

取求解精度 $Tol = 1e - 10$, 当矩阵阶数 $n = 2000, \alpha = 1.1$ 时, A 接近对称矩阵, 三种方法得到迭代收敛效果如图 2. 当矩阵阶数 $n = 2000, \alpha = 20000$ 时, A 是典型的非对称矩阵, 三种方法得到迭代收敛效果如图 3.

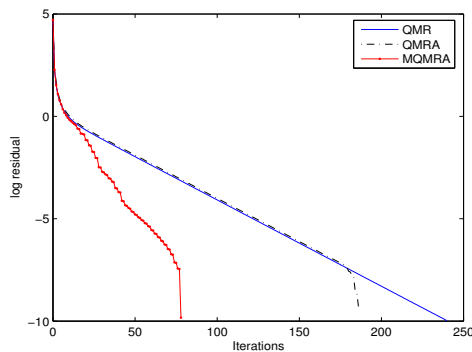


图 2: 算例 2 的数值结果 ($\alpha = 1.1$)

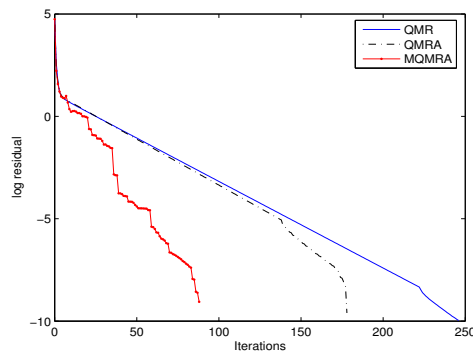


图 3: 算例 2 的数值结果 ($\alpha = 20000$)

算例 3 本例中矩阵 PDE2961 和矩阵 CDDE1, 取自矩阵市场 (<http://math.nist.gov/MarixMarket/>), PDE2961 条件数 $9.49e+02$, 非零元个数为 14585, 阶数 2961; 矩阵 CDDE1 条件数 $4.1e+03$, 非零元素个数为 4681, 阶数 961, 当求解精度为 $Tol = 1e - 8$ 时, 三种算法的收敛效果如图 4 和图 5.

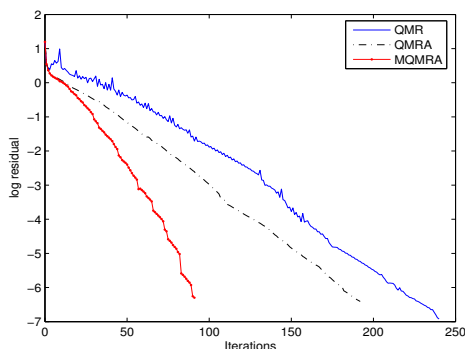


图 4: 算例 3 的数值结果 (PDE2961)

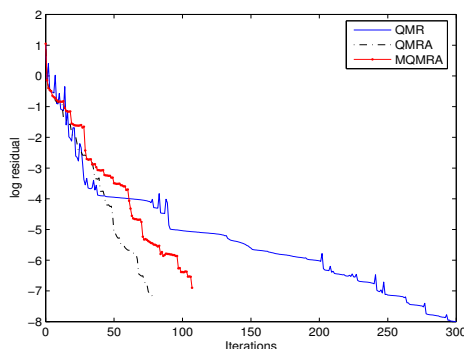


图 5: 算例 3 的数值结果 (CDDE1)

算例 4 [6] 考虑如下二阶椭圆形偏微分方程

$$\begin{cases} cc - \Delta u + 2p_1 u_x + 2p_2 u_y + p_3 u = f, & u \in S, \\ u = 0, & u \in \partial S, \end{cases}$$

其中 $S = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2, 0 < x, y < 1\}$, ∂S 表示 S 的边界, f 是定义在 S 上的函数.

用五点中心差分格式离散该微分方程, 把求解区域 S 划分成网格尺寸为 $h = 1/l + 1$ 的 $(l + 2) \times (l + 2)$ 个均匀正方形网格, 网格点为 $s_i = ih, t_j = jh, 0 \leq i, j \leq l + 1$. 把网格点按自然次序排序得 $l^2 \times l^2$ 块三对角矩阵

$$A = \begin{pmatrix} T & (\beta - 1)I_l & & & \\ -(\beta + 1)I_l & T & (\beta - 1)I_l & & \\ & -(\beta + 1)I_l & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & T & (\beta - 1)I_l \\ & & & -(\beta + 1)I_l & T \end{pmatrix}_{l^2 \times l^2},$$

其中

$$T = \begin{pmatrix} 4 - \sigma & \gamma - 1 & 0 & & \\ -\gamma - 1 & 4 - \sigma & \gamma - 1 & & \\ & -\gamma - 1 & 4 - \sigma & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \gamma - 1 \\ & & & -\gamma - 1 & 4 - \sigma \end{pmatrix}_{l \times l},$$

$\gamma = p_1 h, \beta = p_2 h, \sigma = p_3 h^2$, 线性系统右端的元素为 $h^2 f(s_i, t_j)$, 为简单起见以下算例右端向量取 $b = \text{sum}(A, 2)$, 取 $l = 50, p_1 = 25, p_2 = 50, p_3 = 30$ 得到的结果如图 6.

以下两个表格给出了三种算法迭代次数及 CPU 时间比较, 总体来看, MQMRA 算法的运算迭代次数和所用时间都比 QMR 算法要少, 有的情况下甚至要快很多, 从而加快了收敛速度.

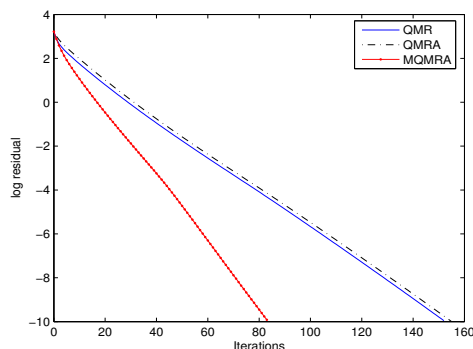


图 6: 算例 4 的数值结果

表 1: 各算法迭代次数比较

算例	QMR 算法	QMRA 算法	MQMRA 算法
算例 1	1097	750	188
算例 2 ($\alpha = 1.1$)	241	188	79
算例 2 ($\alpha = 20000$)	247	179	89
算例 3 (PDE2961)	241	193	92
算例 3 (CDDE1)	301	79	108
算例 4	153	156	84

表 2: 各算法 CPU 时间比较

算例	QMR 算法	QMRA 算法	MQMRA 算法
算例 1	64.4440	84.9270	28.7190
算例 2 ($\alpha = 1.1$)	70.8240	128.7260	63.9130
算例 2 ($\alpha = 20000$)	82.8070	104.9040	58.9840
算例 3 (PDE2961)	113.1980	180.5900	99.4780
算例 3 (CDDE1)	30.9720	15.3820	23.4450
算例 4	27.5700	31.7500	15.6900

5 结论

本文将 QMR 算法中的 Lanczos 双正交过程用 Lanczos 双 A - 正交过程代替, 得到了 QMRA 算法, 进一步将由该算法得到的近似解与最后一个基向量的线性组合来作为新的近似解, 使新近似解的残差范数满足一个一维极小化问题, 从而得到一种基于 Lanczos 双 A - 正交的修正的 QMR 算法. 从数值算例的结果来看, 对于某些大型稀疏矩阵新算法的收敛速度加快、迭代次数减少, 运算效率提高. 该方法也可以考虑和预条件技术相结合来进一步提高计算效率.

参 考 文 献

- [1] Saad Y. Iterative methods for sparse linear systems[M]. U. S.: PW Publishing Company, 1996.
- [2] Jia Z, Elsner L. Improving eigenvectors in Arnoldi's method[J]. Comput. Math., 2000, 18: 265–276.
- [3] Niu Q, Lu L Z, et al. A modified GMRES method for solving large nonsymmetric linear systems[J]. Numer. Math.: J. Chinese Univ., 2005, 27: 193–199.
- [4] Freund R W, Nachtial N M. QMR: a quasi-minimal residual metods for non-Hermitian linear systems[J]. Numer. Math., 1991, 60: 315–339.
- [5] Jing Y F, Carpentieri B, Huang T Z. Experiments with lanczos biconjugate A-orthonormalization methods for MoM discretizations of Maxwell's equations[J]. Prog. Electr. Res., 2009, 99: 427–451.
- [6] 全中, 向淑晔. 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.

A MODIFIED QMR ALGORITHM BASED ON THE A-LANCZOS BIORTHOGONAL PROCESS

ZHANG Jin^a, LI Chun-guang^b, JING He-fang^b

(*a.School of Mathematics and Information Sciences; b.Institute of Numer. Comput. and Engin. Appli.,
Beifang University of Nationnalties, Yinchuan 750021, China*)

Abstract: The quasi minimum residual method (QMR) based on the Lanczos bi-orthogonal process was studied in this paper. *A*-Lanczos bi-orthogonal process was introduced to replace the Lanczos bi-orthogonal process. Using the linear combination of the approximate solution and the lasted basis vectoris as a new approximate solution of the algorithm, the residual norm of new approximate solution can satisfy a one-dimensional minimization problem, so as to get a modified QMR algorithm based on the *A*-Lanczos bi-orthogonal process. The numerical experiments showed that the new algorithm converges faster than the original QMR algorithm for some large sparse linear systems.

Keywords: Krylov subspace methods; bi-conjugate *A*-orthonormalization procedure; linear systems

2010 MR Subject Classification: 65F10