arXiv:2304.03546v2 [math.NA] 8 Nov 2023

一类非厄米线性系统的厄米预条件

Nicole Spillane *

2023年11月9日

关键词： 广义最小残量法,预条件化, 收敛, Krylov子空间方法,GCR, 最小残量迭代**数学分类代码：** 65F10, 65Y05, 68W40

摘要

本文研究非奇异问题中广义最小残量法的收敛性。广义最小残量法被解释为广义共轭残量法，从而可以简洁地证明收敛估计。本文还研究了广义最小残量法中的预条件和加权范数。本文旨在提供一种选择预条件子和广义最小残量法范数的方法，以确保快速收敛。文章主要关注厄米预条件（即使对于非厄米问题也是如此）。本文提出选择厄米预条件子$\mathbf{H}$，并在由$\mathbf{H}$诱导的内积下应用广义最小残量法。此外，如果问题矩阵$\mathbf{A}$是正定的，则可证明一个新的收敛界，该收敛界仅取决于$\mathbf{H}$对$\mathbf{A}$的厄米部分的预条件效果，以及$\mathbf{A}$的非厄米程度。特别是，如果已知$\mathbf{A}$的厄米部分存在可扩展的预条件子，那么所提出的方法也具有可扩展性。本文通过数值结果展示了这一结论。

目录

1 引言 2 2 问题描述、符号与主要结果 3 3 从 WP-GCR 角度看 WP-GMRES 的收敛性 5 3.1 采用右预条件的 WP-GCR .5 3.2 重启与截断版本.8 3.3 关于左预条件的补充说明 .9 **4 对正定 A 进行厄米正定预条件 10** 4.1 厄米正定预条件 .10 4.2 正定$\mathbf{A}$ .12 **5 示例：对流-扩散-反应 14 6 结论 18 A WHP-GCR 的实现 19**

*CNRS, CMAP,巴黎综合理工学院，巴黎理工学院，91128 帕莱索 Cedex，法国（*nicole.spillane@cmap.polytechnique.fr*）

1 引言

GMRES，即广义最小残量法，是求解一般线性系统的首选方法。该方法最初由 [34]，GMRES 的收敛性此后得到了广泛研究 [13, 14, 27, 2, 29, 30]。在本文中，线性系统

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \tag{1}$$

进行了研究。最初，唯一的假设是，$\mathbf{A}$ 是域 $\mathbb{K}$ 上的一般非奇异矩阵，其中 $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ 或 $\mathbb{C}$。随后，研究重点转向厄米预条件，以及厄米部分为正定的矩阵。在上述每种情形下，都对加权广义最小残量算法的收敛性进行了考察。该算法是广义最小残量法的一个版本，其中欧几里得内积被替换为 $(\mathbf{x},\mathbf{y}) \mapsto \langle \mathbf{W}\mathbf{x},\mathbf{y}\rangle$，其中$\mathbf{W}$ 为厄米正定矩阵。本工作的目标是证明一个收敛界限，进而可以据此以智能的方式选择预条件子 $\mathbf{H}$ 和权矩阵 $\mathbf{W}$ 。

当 $\mathbf{A}$ 为正定时，GMRES在欧几里得内积下的收敛性在 [13] 中得到了研究。有趣的是， [13] 早于 [34] 中 GMRES 的引入，因为其中的结果针对的是广义共轭残量算法，即 GCR（该算法产生与 GMRES 相同的迭代序列）。

在博士论文 [7], 中，Cai 提出，对于应用于矩阵 $\mathbf{P}$ 的广义最小残量法，应选择一种内积，使其“能够利用$\mathbf{P}$的某些特殊性质”。Cai 与 Widlund [9], 合作，为非对称和不定二阶偏微分方程提出了区域分解预处理器。广义最小残量法采用由变分形式中的最高阶项诱导的范数来考察：能量范数。下文将进一步介绍这些结果。另一种已提出的选择 [42] 是，在由对称正定（spd）预条件子的逆所诱导的内积下应用广义最小残量法。后来，另一组作者在 [11]中以如下论点为这一选择提供依据：若$\mathbf{H}$ 为正定且$\mathbf{A}$ 近似对称，则$\mathbf{H}\mathbf{A}$ 近似为$\mathbf{H}^{-1}$-自伴。在 [26], 中，作者研究了鞍点问题的预处理，并在由非对称三角预处理器导出的内积下应用了 [42] 中的界。 [32] 的作者探讨了如何寻找内积，使一般预处理系统近似正规或近似非对称。在 [35]中可以找到如今称为加权广义最小残量法的详细介绍，其中既包括收敛性结果，也包括实现策略。在 [15], 中，作者在一般框架下重新提出了在广义最小残量法中改变范数的想法，并创造了加权广义最小残量法这一术语。[15] 所考虑的内积由权重对角矩阵定义，这些权重在每次方法重启时都会改变。较大的权重对应于上一迭代周期结束时残量中较大的分量，从而加快收敛。 [18]将这一想法与广义最小残量法的其他加速方法进行了比较。

第 4.2 节提出的方法假设，已知一个高效的预条件子 $\mathbf{H}$，用于 $\mathbf{A}$ （即 $1/2(\mathbf{A} + \mathbf{A}^*)$）的厄米部分。求解非厄米问题（针对 $\mathbf{A}$）时，在广义最小残量法中也使用同一个 $\mathbf{H}$ 。本文末尾将以有限元离散的对流-扩散-反应方程为例进行求解。预条件子 $\mathbf{H}$ 选为两层区域分解预条件子 [43]，其粗空间采用 [38, 39] 介绍的 GenEO（另见 [40, 19, 25, 10, 31, 37] ，其中列举了部分扩展及相关工作）。例如，已有研究，在 [24], 中证明，GenEO 是求解对称正定问题的一种非常强大且可扩展的求解器。

通过分离矩阵的厄米部分与反厄米部分来近似线性系统解的思路，已应用于 [1] 中提出的厄米-反厄米分裂方法。 [7, 9] 开辟了非对称正定问题区域分解领域的研究（另见 [43][第 11] 章）。作者采用基于粗网格粗空间的两层加性施瓦茨预条件子求解对流-扩散-反应问题。预条件子中的单层部分

有两种形式：局部求解器可以来自原始（非对称和/或不定）矩阵，也可以来自问题矩阵的对称正定部分。广义最小残量法采用由该对称正定部分诱导的范数。在这两种情况下，粗空间投影算子都针对原始算子。如果粗网格足够细，则证明收敛率与自由度数量和局部问题数量无关（即具有可扩展性）。对于子域大小条件存在的原因，一个简化的解释是：为了使理论成立，二阶项必须占主导地位。已知直径为 $-\Delta$ 的规则子域上的第一个非零特征值为 H 的量级 $1/H$。将该算法推广到任何可视为对称正定矩阵扰动的矩阵。他们提出的预条件子由一个针对对称正定部分的高效预条件子和一次粗空间求解组成。参数 δ_0 用于衡量粗空间弥补原问题与对称正定问题之间差距的效率，并被纳入收敛估计。在与其他算法进行数值比较时，该算法后来被称为 CSPD，即粗网格加对称正定预条件 [8]。

最近，已有研究探讨了亥姆霍兹方程的区域分解方法 [16, 17]。该问题是对称不定的，并且在能量范数中应用广义最小残量法是证明的关键部分。加权广义最小残量法也被用于研究应用于不定问题和非自伴问题的对称正定 GenEO特征值问题 [5, 6]。研究证明并通过数值实验观察到，GenEO在一类二阶非对称正定问题上同样表现良好。最后， [3] 的作者为非厄米或不定问题的一层加性施瓦茨方法证明了一个抽象框架。他们通过求解对流-扩散-反应方程来说明其结果。本文采取了一条更偏代数的路径，并证明了不局限于区域分解的结果。

本文其余部分的结构如下。在第2节中，我们将介绍一些记号，并且定理1 概述一些收敛结果及其与现有结果的联系。在第3节中，我们通过研究与GMRES算法等价的GCR算法来研究GMRES算法。定理3 证明了一个与数值域（或Elman）估计 [13, 14,2]相关的收敛界。在第4.1节中，定理5考虑了预条件子$\mathbf{H}$ 为厄米矩阵，并在$\mathbf{H}$ 内积下（或对于左预条件广义最小残量法，在$\mathbf{H}^{-1}$ 下）应用GMRES/GCR的特殊情形。对于正定的$\mathbf{A}$，定理6 证明了最终的收敛估计，明确说明了$\mathbf{A}$的非厄米性使收敛速度减慢的程度。作为这一结果的说明，在第5节中，我们针对对流-扩散-反应方程提出了一种求解器。该预条件子是一个带有GenEO谱粗空间的区域分解预条件子。这样一来，该问题的厄米部分便得到了非常好的预条件。理论上证明了整体收敛性不依赖于子域的数量（可扩展性），也不依赖于离散步长。数值实验表明，对于轻度非厄米问题，厄米预条件可以非常高效且具有良好的可扩展性。

2 所提出的问题、符号与主要结果

令$\mathbf{K}$ $= \mathbb{R}$ 或 $\mathbb{C}$ 为研究该线性系统所基于的域。令$\mathbf{A}$ $\in \mathbb{K}^{n\times n}$为一个非奇异矩阵。给定任意 $\mathbf{b} \in \mathbb{K}^n$，当前问题是求$\mathbf{x}$ $\in \mathbb{K}^n$ 使得：

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

所采用的方法是应用加权预条件（WP-）广义最小残量法。令$\mathbf{H}$ $\in \mathbb{K}^{n\times n}$ 表示预条件子，令$\mathbf{W}$ $\in \mathbb{K}^{n\times n}$ 表示权矩阵。假设$\mathbf{H}$ 是非奇异的，并且$\mathbf{W}$ 是厄米正定的（厄米特正定）。

由$\mathbf{W}$ 诱导的内积和范数分别记为 $\langle\cdot,\ \cdot\rangle_{\mathbf{W}}$ 和 $\|\cdot\|_{\mathbf{W}}$:

$$\langle \mathbf{x},\mathbf{y}\rangle_{\mathbf{W}} = \langle \mathbf{W}\mathbf{x},\mathbf{y}\rangle = \langle \mathbf{x},\mathbf{W}\mathbf{y}\rangle = \mathbf{y}^{*}\mathbf{W}\mathbf{x} \text{ and } \|\mathbf{x}\|_{\mathbf{w}} = \langle \mathbf{x},\mathbf{x}\rangle_{\mathbf{W}}{}^{1/2},\ \forall \mathbf{x},\ \mathbf{y}\in\mathbb{K}^{n}.$$

任意矩阵 $\mathbf{B}\in\mathbb{K}^{n\times n}$ 都可以分解为其厄米部分与斜厄米部分之和。所用的记号为

$$\mathbf{M}(\mathbf{B}) = \frac{\mathbf{B}+\mathbf{B}^{*}}{2} \text{ (Hermitian part) and } \mathbf{N}(\mathbf{B}) = \frac{\mathbf{B}-\mathbf{B}^{*}}{2}\text{(skew-Hermitian part).} \quad (2)$$

本文的一些结果概述如下定理所示。

定理 1 (主要结果概述**).** 假设算子 $\mathbf{A}\in\mathbb{K}^{n\times n}$ 和预条件子 $\mathbf{H}\ \in\mathbb{K}^{n\times n}$ 均非奇异，且权矩阵 $\mathbf{W}\ \in\mathbb{K}^{n\times n}$ 为厄米特正定。采用右预条件的加权预条件 *GMRES*（*WP-GMRES*）的第 i 次迭代满足

$$\begin{aligned}\frac{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{W}}} &\le \left[1-\inf_{\mathbf{y}\neq 0}\frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle_{\mathbf{W}}|^2}{\|\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}^2\|\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}^2}\right]^{i/2}\\ &\le \left[1-\inf_{\mathbf{y}\neq 0}\frac{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A}^{-1})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}\times\inf_{\mathbf{y}\neq 0}\frac{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}\right]^{i/2} \quad \textit{if } \mathbf{H}=\mathbf{W} \textit{ is hpd}\\ &\le \left[1-\frac{1/\kappa(\mathbf{H}\mathbf{M}(\mathbf{A}))}{1+\rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A}))^2}\right]^{i/2} \textit{if } \mathbf{H}=\mathbf{W} \textit{ is hpd and } \mathbf{A} \textit{ positive definite,}\end{aligned}$$

其中，$\kappa(\mathbf{H}\mathbf{M}(\mathbf{A}))$ 是$\mathbf{H}\mathbf{M}(\mathbf{A})$ 的条件数，而 $\rho(\cdot)$ 表示矩阵的谱半径。对于最后两个估计，假设预条件子$\mathbf{H}$ 为厄米特正定，且$\mathbf{W}$ =$\mathbf{H}$。在这种情况下，该算法称为带厄米预条件子的加权方法（*WHP-GMRES*）。

证明。 证明过程如下。首先，在定理 2中，证明了加权 GCR 与预处理 GCR（即 WP-GCR，算法 1）和 WP-GMRES 等价，前提是原点不属于预处理算子的数值域。反之，上述界可简化为 $\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}\le\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{W}}$，这是一个平凡的结果。定理中的第一个估计针对 WP-GCR 在定理 3中得到证明。定理中的第二个估计针对 WHP-GCR（其中 HP 同样表示厄米预处理）在定理 5中得到证明。当 $\mathbf{H}$ 为对称正定矩阵，且 $\mathbf{W}$ =$\mathbf{H}$时，它可直接由第一个估计推出。定理中的最后一个估计在推论 2 中得到证明。

□

与先前结果的联系 此前已有研究考虑值域估计。定理中的第一条结果推广了 [41][定理6。1] （更准确地说，推广了证明中的倒数第二行）。在 [41][定理6。2],中也指出，W =H 正定的情形特别重要，且可简化为定理中的第二个估计（另见早期研究 [42][定理 3。2]）。这些开创性工作研究了由椭圆型和有界变分问题离散化所产生的问题。本文直接以代数形式研究该问题。即使矩阵并非源自椭圆偏微分方程，甚至不是正定矩阵，前两个估计也可能具有参考价值。WHP-GMRES 与 [14] 第 10.4 节中的算法也有关联；该算法采用分裂预条件，左侧乘以 $\mathsf{S}^{\top}$ ，右侧乘以 S。分裂预条件的适用范围非常有限，但可以证明，它等价于 H =$\mathsf{S}\mathsf{S}^{\top}$ 时的 WHP-GMRES。这样便可将 [14] 第 10.4 节中的界推广到 WHP-GMRES。即便如此，由于条件数被平方，该结果仍不如定理 1 中的第三个界精确。最后，本文将这些界推广到了复数情形，此时不再有 ⟨Ay, y⟩ = ⟨M(A)y, y⟩成立。

3 从 WP-GCR 的角度看 WP-GMRES 的收敛性

GCR [13]，也称为 Orthomin [45] 与广义最小残量法等价，即每次迭代生成相同的近似解。通常更倾向于使用广义最小残量法，因为它的计算开销略低且稳定性更好。不过，GCR 的表述更简单，本文中的证明也都源自广义最小残量法的 GCR 表述。

3.1 带右预条件的 WP-GCR

算法 1 中给出了带右预条件的加权预条件 GCR（WP-GCR）1。初始猜测 $\mathbf{x}_0$ 被假定为 $\mathbb{K}^n$中的任意向量。

算法 1 带右预条件的 WP-GCR

Require: $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$
  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$
  $\mathbf{z}_0 = \mathbf{H}\mathbf{r}_0$
  $\mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0$
  $\mathbf{q}_0 = \mathbf{A}\mathbf{p}_0$
  for $i = 0, 1, \ldots,$ convergence **do**
    $\delta_i = \langle \mathbf{q}_i, \mathbf{q}_i \rangle_{\mathbf{W}}; \quad \gamma_i = \langle \mathbf{q}_i, \mathbf{r}_i \rangle_{\mathbf{W}}; \quad \alpha_i = \gamma_i / \delta_i$
    $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$
    $\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{q}_i$
    $\mathbf{z}_{i+1} = \mathbf{H}\mathbf{r}_{i+1}$
    for $j = 0, 1, \ldots, i$ **do**
      $\Phi_{i,j} = \langle \mathbf{q}_j, \mathbf{A}\mathbf{z}_{i+1} \rangle_{\mathbf{W}}; \quad \beta_{i,j} = \Phi_{i,j} / \delta_j$
    end for
    $\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}_{i+1} - \sum_{j=0}^{i} \beta_{i,j} \mathbf{p}_j$
    $\mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{A}\mathbf{z}_{i+1} - \sum_{j=0}^{i} \beta_{i,j} \mathbf{q}_j$
  end for
  return Return $\mathbf{x}_{i+1}$

在下面的定理中，我们将证明 WP-GCR 确实等价于 WP-GMRES，除非 WP-GCR 出现非理想的崩溃。这种情况只有在 0 位于$\mathbf{W}$的$\mathbf{AH}$值域中时才会发生，该集合定义如下：

$$W_{\mathbf{W}}(\mathbf{AH}) = \left\{ \frac{\langle \mathbf{AHu}, \mathbf{u} \rangle_{\mathbf{W}}}{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle_{\mathbf{W}}}; \mathbf{u} \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\} \right\}. \tag{3}$$

尽管该证明并非新的，但仍将其纳入本文。事实上，证明中的一些中间结果将在后续证明中使用。

定理 2. 假设算子 $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n\times n}$ 和预条件子 $\mathbf{H} \in \mathbb{K}^{n\times n}$ 均非奇异，且权矩阵 $\mathbf{W} \in \mathbb{K}^{n\times n}$ 是厄米特正定的。算法 i的第 - 个残量满足1。

$$\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}} = \min \{ \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|_{\mathbf{W}}; \mathbf{x} \in \mathbf{x}_0 + \operatorname{span}\{\mathbf{p}_0, \ldots, \mathbf{p}_{i-1}\} \}. \tag{4}$$

此外，如果 $0 \notin W_{\mathbf{W}}(\mathbf{AH})$，那么 张成$\{\mathbf{p}_0, \ldots, \mathbf{p}_{i-1}\} = \mathcal{K}_i$ 其中

$$\mathcal{K}_i := \{\mathbf{H}\mathbf{r}_0, \mathbf{HAH}\mathbf{r}_0, \ldots, (\mathbf{HA})^{i-1}\mathbf{H}\mathbf{r}_0\}$$

是克雷洛夫子空间，即 *WP-GCR* 返回与 *WP-* 广义最小残量法相同的近似解。

证明。 向量 $\mathbf{q}_i = \mathbf{A}\mathbf{p}_i$ 两两正交，即，

$$\langle \mathbf{q}_j, \mathbf{q}_i \rangle_{\mathbf{W}} = 0 \text{ if } i \neq j. \tag{5}$$

事实上，由对称性，只需通过对 $i \geq 0$ 递归证明： $\langle \mathbf{A}\mathbf{p}_i, \mathbf{A}\mathbf{p}_j \rangle_{\mathbf{W}} = 0$对每个 $j < i$ 都成立。只需回顾 $\mathbf{p}_i$ 和 $\beta_{i,j}$ 的定义即可轻松得证。

接下来，将证明最小化性质（4）。通过直接递推可得 $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_0 - \sum_{j=0}^{i-1} \gamma_j/\delta_j \mathbf{A}\mathbf{p}_j$。注意到 $\gamma_i = \langle \mathbf{q}_i, \mathbf{r}_i \rangle_{\mathbf{W}} = \langle \mathbf{q}_i, \mathbf{r}_0 \rangle_{\mathbf{W}} - \sum_{j=0}^{i-1} \gamma_j/\delta_j \langle \mathbf{q}_i, \mathbf{A}\mathbf{p}_j \rangle = \langle \mathbf{q}_i, \mathbf{r}_0 \rangle_{\mathbf{W}}$ 根据（5）。现在，第 i个残量可重写为

$$\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i = \sum_{j=0}^{i-1} \frac{\langle \mathbf{A}\mathbf{p}_j, \mathbf{r}_0 \rangle_{\mathbf{W}}}{\langle \mathbf{A}\mathbf{p}_j, \mathbf{A}\mathbf{p}_j \rangle_{\mathbf{W}}} \mathbf{A}\mathbf{p}_j.$$

这意味着$\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i$ 是$\mathbf{W}$-正交投影到 $\text{span}\{\mathbf{q}_j$上的$\mathbf{r}_0$； $j < i\}$。正交投影的另外两种等价刻画为

$$\mathbf{r}_i \in \mathbf{r}_0 + \text{span}\{\mathbf{q}_j;\, j < i\} \text{ with } \mathbf{r}_i = (\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i) - \mathbf{r}_0 \perp^{\mathbf{W}} \text{span}\{\mathbf{q}_j;\, j < i\}, \tag{6}$$

且 $\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}} = \min\{\|\mathbf{r}\|_{\mathbf{W}};\ \mathbf{r} \in \mathbf{r}_0 + \text{span}\{\mathbf{q}_j;\ j < i\}\}$。于是，通过变量替换4）可得式$\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$ 且$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$。

还需证明 $\text{span}\{\mathbf{p}_j;\ j < i\} = \mathcal{K}_i$。显然，$\text{span}\{\mathbf{p}_j;\ j < i\} \subset \mathcal{K}_i$。除非 $\mathbf{A}\mathbf{z}_{i-1} \in \text{span}\{\mathbf{q}_j;\ j < i-1\}$，否则反向包含关系成立。于是，由式（6），$\mathbf{r}_{i-1} \perp^{\mathbf{W}} \mathbf{A}\mathbf{z}_{i-1}$，即，$\langle \mathbf{r}_{i-1}, \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{r}_{i-1} \rangle_{\mathbf{W}} = 0 = \gamma_{i-1}$。若 $0 \notin W_{\mathbf{W}}(\mathbf{A}\mathbf{H})$，则这意味着 $\mathbf{r}_{i-1} = \mathbf{0}$，这是 GCR 和广义最小残量法均发生幸运的提前终止。证明最后回顾预处理广义最小残量法第 i 次迭代的刻画，例如见[33][第 9] 节。按照 [7, 15], 中的思路，可以将欧几里得内积替换为 W-内积，从而得到 WP-GMRES 的结果。 □

可以作出以下观察：

- 预条件会改变 Krylov 子空间。
- 加权会改变所最小化的残量范数。
- 加权不会改变 Krylov 子空间。

接下来通过比较两个连续的残量来讨论算法的收敛速度。

定理 3 (WP-GCR 的收敛性)。 假设算子 $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n\times n}$ 和预条件子 $\mathbf{H} \in \mathbb{K}^{n\times n}$ 均非奇异，且权矩阵 $\mathbf{W} \in \mathbb{K}^{n\times n}$ 是厄米特正定的。算法 i 的第 - 个迭代*1* 满足

$$\frac{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{W}}} \leq \left(1 - \inf_{\mathbf{y}\neq\mathbf{0}} \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle_{\mathbf{W}}|^2}{\|\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}^2 \|\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}^2}\right)^{i/2}. \tag{7}$$

证明。 由残量更新公式可得 $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i+1} + \alpha_i \mathbf{q}_i$。根据 α_i 的选择，$\mathbf{r}_{i+1} \perp^{\mathbf{W}} \mathbf{q}_i$，因此

$$\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}^2 = \|\mathbf{r}_{i+1}\|_{\mathbf{W}}^2 + |\alpha_i|^2 \|\mathbf{q}_i\|_{\mathbf{W}}^2 = \|\mathbf{r}_{i+1}\|_{\mathbf{W}}^2 + \frac{|\langle \mathbf{q}_i, \mathbf{r}_i \rangle_{\mathbf{W}}^2|}{\|\mathbf{q}_i\|_{\mathbf{W}}^4} \|\mathbf{q}_i\|_{\mathbf{W}}^2.$$

连续两次迭代之间残量的相对降幅为

$$\frac{\|\mathbf{r}_{i+1}\|_{\mathbf{W}}^2}{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}^2} = 1 - \frac{|\langle \mathbf{q}_i, \mathbf{r}_i\rangle_{\mathbf{W}}|^2}{\|\mathbf{q}_i\|_{\mathbf{W}}^2 \|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}^2}. \tag{8}$$

$i-1$取$\mathbf{W}$内积$\mathbf{q}_i = \mathbf{A}\mathbf{z}_i - \sum_{j=0} \mathbf{q}_j \beta_{i,j}$ 由$\mathbf{r}_i$ 可得

$$\langle \mathbf{q}_i, \mathbf{r}_i\rangle_{\mathbf{W}} = \langle \mathbf{A}\mathbf{z}_i, \mathbf{r}_i\rangle_{\mathbf{W}} - \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{i,j}\langle \mathbf{q}_j, \mathbf{r}_i\rangle_{\mathbf{W}} = \langle \mathbf{A}\mathbf{z}_i, \mathbf{r}_i\rangle_{\mathbf{W}},$$

and

$$\frac{\|\mathbf{r}_{i+1}\|_{\mathbf{W}}^2}{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}^2} = 1 - \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{z}_i, \mathbf{r}_i\rangle|_{\mathbf{W}}^2}{\|\mathbf{q}_i\|_{\mathbf{W}}^2 \|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}^2} = 1 - \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i\rangle_{\mathbf{W}}|^2}{\|\mathbf{q}_i\|_{\mathbf{W}}^2 \|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}^2}. \tag{9}$$

接下来，由正交化公式和（5）可推得

$$\|\mathbf{A}\mathbf{z}_i\|_{\mathbf{W}}^2 = \|\mathbf{q}_i + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{i,j}\mathbf{q}_j\|_{\mathbf{W}}^2 = \|\mathbf{q}_i\|_{\mathbf{W}}^2 + \sum_{j=0}^{i-1} |\beta_{i,j}|^2 \|\mathbf{q}_j\|_{\mathbf{W}}^2 \geq \|\mathbf{q}_i\|_{\mathbf{W}}^2. \tag{10}$$

最后，算法1 的两次相邻迭代之间残量的下降量有如下界

$$\frac{\|\mathbf{r}_{i+1}\|_{\mathbf{W}}}{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}} \leq \left[1 - \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{z}_i, \mathbf{r}_i\rangle|_{\mathbf{W}}^2}{\|\mathbf{A}\mathbf{z}_i\|_{\mathbf{W}}^2 \|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}^2}\right]^{1/2} = \left[1 - \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i\rangle_{\mathbf{W}}|^2}{\|\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}^2 \|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}^2}\right]^{1/2}, \tag{11}$$

其中，柯西-施瓦茨不等式保证了平方根有定义。 □

接下来，将其重新表述，以符合 [13] 中一项经常被引用的结果（众多结果之一）。

推论 1（数值域估计，亦称 Elman 估计）。 在定理 *3*的假设下， *i*算法 *1* 的第 次迭代满足

$$\frac{\|\mathbf{r}_{i+1}\|_{\mathbf{W}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{W}}} \leq \left[1 - \frac{d(0, W_{\mathbf{W}}(\mathbf{A}\mathbf{H}))^2}{\|\mathbf{A}\mathbf{H}\|_{\mathbf{W}}^2}\right]^{i/2},$$

其中

- $d(0, W_{\mathbf{W}}(\mathbf{A}\mathbf{H}))$ = 下确界 $\left\{ |\langle \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{u}, \mathbf{u}\rangle| \mathbf{u}\mathbf{w}\mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{w};\ \mathbf{u} \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\} \right\}$ 表示 $\mathbf{W}$-域 $\mathbf{A}\mathbf{H}$的值域到零的距离，该值域定义于 (3)中，
- $\|\mathbf{A}\mathbf{H}\|_{\mathbf{W}}$ 表示由向量范数 $\mathbf{W}$诱导的矩阵范数。

证明。 式（7）中的各项可分组为

$$\left[\frac{\langle \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y}, \mathbf{y}\rangle_{\mathbf{W}}}{\|\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}^2} \times \frac{\|\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}}{\|\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}}\right]^2 \geq \left[\frac{d(0, W_{\mathbf{W}}(\mathbf{A}\mathbf{H}))}{\|\mathbf{A}\mathbf{H}\|_{\mathbf{W}}}\right]^2, \tag{12}$$

其中，分子使乘积中的第一项最小化，分母使第二项倒数最大化。

□

定理 3 的结果强于推论中的数值域估计1 ，如 [28] 和 [12]中所述。事实上，定理 C 3 中的 $d(0, W_{\mathbf{W}}(\mathbf{A}\mathbf{H}))$ 和 $\|\mathbf{A}\mathbf{H}\|_{\mathbf{W}}$ 的界可以分别在不必对其进行界定的情况下得到。换句话说， C 中的项可以采用不同于值域界的分组方式。下一节将采用这种方式，最初由 [42]提出。

注 1（失效与 WP-GMRES 的等价性）。 如果 0 属于 $\mathbf{W}$-值域（由 $\mathbf{HA}$给出），埃尔曼估计的右端为 1，使其失去作用。事实上， *[13]* 中的证明假设 $\mathbf{A}$ 是正定的，因此未考虑 0 位于值域中的情形。不过，该公式并非错误，因为它表明 $\mathbf{r}_{i+1} \leq \mathbf{r}_i$。

如果0 属于$\mathbf{HA}$的$\mathbf{W}$-数值域，则可能出现 $\gamma_i = \langle \mathbf{q}_i, \mathbf{r}_i \rangle_{\mathbf{W}} = \langle \mathbf{AHr}_i - \sum_{j=0}^{i-1} \Phi_{ij}/\delta_j \mathbf{q}_j \rangle_{\mathbf{W}} = \langle \mathbf{AHr}_i, \mathbf{r}_i \rangle_{\mathbf{W}} = 0$。此时残量不会更新（$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i$），而下一个搜索方向 $\mathbf{AHr}_i$ 会与所有之前的搜索方向（包括其自身）正交化。换言之，$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{0}$。算法在将残量归零之前就发生了故障。这是 *WP-GCR* 中搜索方向计算方式所特有的现象。如果$\mathbf{A}$ 非奇异（这是充分但非必要条件），则 *WP-GMRES* 中不会发生这种不利的故障。如果 *GCR* 中发生这种不利的故障，可以重启算法，并按照加权预条件 *Orthodir* 算法的方式计算接下来的几个搜索方向。

理解 *WP-GCR* 可能发生崩溃的一种非常简单的方法是，考虑取$\mathbf{r}_0$ 使得 $\langle \mathbf{r}_0, \mathbf{AHr}_0 \rangle_{\mathbf{W}} = 0$。

备注 2. 最小化 $|\langle \mathbf{HAx}, \mathbf{x} \rangle_{\mathbf{W}}| / \langle \mathbf{HAx}, \mathbf{HAx} \rangle_{\mathbf{W}}$ 等价于最小化$|\langle \mathbf{y}, (\mathbf{HA})^{-1}\mathbf{y} \rangle_{\mathbf{W}}| / \langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle_{\mathbf{W}}$，其中变量替换为$\mathbf{y} = \mathbf{HAx}$。这也说明，*WP-GMRES* 的残量有界，其界与$\mathbf{W}$-域中 $\mathbf{AH}$ 的特征值到零的距离以及$(\mathbf{AH})^{-1}$ 的特征值到零的距离的乘积有关，如 *[42]*所示。

3.2 重启和截断版本

在 WP-GCR 和 WP-GMRES 中，新的搜索方向都要对所有先前的搜索方向进行正交化。如果算法需要经过许多次迭代才能收敛，那么从计算和存储角度来看，这一过程的成本可能会高得难以承受。早在 [13, 45] 中，人们就提出了这些算法成熟的变体：要么截断正交化过程（加权预条件 Orthomin(k)，或 WP-Orthomin(k)），要么每隔 k 次迭代重启算法（WP-GMRES(k)、WP- GCR(k)）。若 $k = 0$，则完全不进行正交化，此时该算法称为加权预条件最小残量迭代（WP-MR）。一个鲜为人知的事实是，定理 3 给出的收敛结论适用于所有重启和截断版本的算法。这一点早已被[13]充分认识。

定理 4（截断和重启版本的收敛性）。 定理 *3*中的结果适用于 *WP-GCR*、*WP-GMRES*以及它们所有的截断和重启版本，包括 *WP-MR*。

证明。 沿用 [13] 中的编号约定。
重启算法：*WP-GCR(k)* 或 *WP-GMRES(k)* 在第一个迭代周期（即，直到计算出 $\mathbf{r}_{k+1}$ 为止），定理 3 适用。第二个迭代周期包括$k+1$ 次以初始猜测 $\mathbf{x}_{k+1}$进行的广义最小残量法迭代。对于 $k+2 \leq i \leq 2k+2$，定理3 中的结果成立，因为

$$\frac{\|\mathbf{r}_{k+1}\|_{\mathbf{W}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{W}}} \times \frac{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}}}{\|\mathbf{r}_{k+1}\|_{\mathbf{W}}} \leq \left(1 - \inf_{\mathbf{y} \neq \mathbf{0}} \frac{|\langle \mathbf{AHy}, \mathbf{y} \rangle_{\mathbf{W}}|^2}{\|\mathbf{AHy}\|_{\mathbf{W}}^2 \|\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}^2}\right)^{\frac{k+1}{2} + \frac{i-(k+1)}{2}}.$$

而且，这一论证可推广到任意次数的重启。
WP-MR 和 *WP-Orthomin(k)* 这些算法通过替换公式来定义
for 算法 1 中 WP-MR 的搜索方向 $\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}^{i+1}$ 以及 $\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}^{i+1} -$

$_i\sum$ $\beta_{i,\ j}\mathbf{p}^j$ 适用于 WP-Orthomin(k)。$\mathbf{q}_i$ 的公式也作了相应修改，使得$_{\max(0,\ i-k+1)}\mathbf{q}_i = \mathbf{A}\mathbf{p}_i$。定理 3 的证明中的公式（8）仍然成立，因为更新公式没有改变。WP-MR 的其余证明直接成立（令 $\mathbf{q}_i = \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{r}_i$ 即可），而 Orthomin(k) 的证明也很容易调整（截断求和即可）。

□

方程（9）和（10）说明了正交化如何发挥作用：减小 $\|\mathbf{q}_i\|_{\mathbf{W}}$ 会使残量减小，而正交化正是实现这一点的方法。完全正交化为$\mathbf{q}_i$ 在$\mathbf{A}\mathcal{K}_i$中提供了最佳选择。一个非常重要的认识是，数值域收敛界以及本文中的所有收敛界都没有考虑正交化带来的优势。因此，将它们用于 WP-GMRES 和 WP-GCR 时，预计会过于悲观。

由此可以得出两个结论。其一，如果收敛界预测的残量降幅令人满意，那么可以采用 WP-MR，或其他截断算法或重启算法。其二，如果理论保证的降幅不令人满意，那么可以采用完整的 WP-GCR/WP-GMRES，并希望该界过于悲观。实践中很可能确实如此，因为 WP-GCR/WP-GMRES 往往表现出超线性收敛。本文所介绍的这类收敛界可以用来检验算法不会停滞（或近乎停滞），而超线性收敛行为也应会随之显现。

后续所有收敛性证明都通过对定理中最小化的量进行变换得出 3 和 4 因此，对于算法的截断版本和重启版本，这些证明同样成立。

3.3 关于左预条件的说明

左预条件，即 求解 $\mathbf{HAx} = \mathbf{Hb}$ 可以替代右预条件。为完整起见，算法 2 给出了左预条件 WP-GCR。算法 i 的第 - 个残量满足 2

算法 2 采用左预条件的 WP-GCR

要求： $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0 \mathbf{z}_0 = \mathbf{H}\mathbf{r}_0 \mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0 \mathbf{y}_0 = \mathbf{HAp}_0$**对于** $i = 0$，**1**，**...**，**收敛执行** $\delta_i = \langle \mathbf{y}_i$，$\mathbf{y}_i \rangle_{\mathbf{W}}$；$\gamma_i = \langle \mathbf{y}_i$，$\mathbf{z}_i \rangle_{\mathbf{W}}$；$\alpha_i = \gamma_i / \delta_i \mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i \mathbf{z}_{i+1} = \mathbf{z}_i - \alpha_i \mathbf{y}_i$**对于** $j = 0$，**...**，i **执行** Φ_i，$_j = \langle \mathbf{y}_j$，$\mathbf{HAz}_{i+1} \rangle_{\mathbf{W}}$；$\beta_i$，$_j = \Phi_i$，$_j / \delta_j$**结束循环** $_i \mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}_{i+1} - \sum \beta_i$，$_j \mathbf{p}^j{}_{j=0} {}_i \mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{HAz}_{i+1} - \sum \beta_i$，$_j \mathbf{y}^j{}_{j=0}$**结束循环 返回** $\mathbf{x}_{i+1}$

$$\|\mathbf{z}_i\|_{\mathbf{W}} = \|\mathbf{H}\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{W}} = \min\left\{\|\mathbf{H}(\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x})\|_{\mathbf{W}};\ \mathbf{x}\in\mathbf{x}_0+\operatorname{span}\{\mathbf{p}_0,\ldots,\mathbf{p}_{i-1}\}\right\}.$$

此外，如果 $0\notin W_{\mathbf{W}}(\mathbf{HA})$，则 $\operatorname{span}\{\mathbf{p}_0,\ldots,\mathbf{p}_{i-1}\}=\mathcal{K}_i$(Krylov 子空间)，因此 WP-GCR 再次返回与 WP-GMRES 相同的近似解。按照第 3.1 节中的相同步骤，可以证明

$$\frac{\|\mathbf{z}_{i+1}\|_{\mathbf{W}}^2}{\|\mathbf{z}_i\|_{\mathbf{W}}^2} = 1-\frac{\langle\mathbf{y}_i,\mathbf{z}_i\rangle_{\mathbf{W}}^2}{\langle\mathbf{y}_i,\mathbf{y}_i\rangle_{\mathbf{W}}\langle\mathbf{z}_i,\mathbf{z}_i\rangle_{\mathbf{W}}} \le 1-\frac{\langle\mathbf{H}\mathbf{A}\mathbf{z}_i,\mathbf{z}_i\rangle_{\mathbf{W}}^2}{\langle\mathbf{H}\mathbf{A}\mathbf{z}_i,\mathbf{H}\mathbf{A}\mathbf{z}_i\rangle_{\mathbf{W}}\langle\mathbf{z}_i,\mathbf{z}_i\rangle_{\mathbf{W}}}.$$

由此可得以下结论:

- 左预条件与右预条件产生相同的 Krylov 子空间。
- 左预条件会改变最小化性质中所考虑的残量以及 Krylov 子空间。

- 在 $\mathbf{H}^{-1}$-内积下进行左预条件，与在 $\mathbf{H}$-内积下进行右预条件是等价的（正如 [33][问题 9.13] 所示）。

4 对正定 A 进行厄米正定预条件

收敛性研究现在聚焦于一些不完全一般的情形。

4.1 厄米正定预条件

这里作出两个强假设:

1. 预条件子 $\mathbf{H}$ 是厄米特正定的；2. 内积由预条件子诱导:

$\mathbf{W}$ $=\mathbf{H}$。

采用右厄米特正定预条件的 WP-GCR，且 $\mathbf{W}$ $=\mathbf{H}$ 的形式如算法 3所示。这里采用 WHP-GCR 这一名称，其中 HP 表示厄米预条件。我们重新安排了运算，使其相较于非加权 GCR 不需要额外应用 $\mathbf{H}$ （初始化时除外）。额外开销是存储向量 $\mathbf{y}^j$ $=\mathbf{H}\mathbf{q}^j$。算法 4 和 5 （见附录）给出了两个替代版本，它们所需的存储量不超过非加权 GCR。虽然此处未作详细说明，但在 GMRES 算法中也可以采用相同的节省开销措施。还要注意，如果预条件子 $\mathbf{H}$ 的应用开销很低，那么每次迭代应用两次完全可行。在这种情况下，只需运行右预条件 GCR 或 GMRES 代码，并将内积改为 $\langle\cdot,\ \cdot\rangle_{\mathbf{H}}$。

应用定理 2后，WHP-GCR（算法3）可通过以下性质刻画为一种 Krylov 子空间方法。首先，向量 $\mathbf{q}_i$ $=\mathbf{A}\mathbf{p}_i$ 在 $\mathbf{H}$-内积下两两正交。其次，残量满足以下极小化性质：$\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{H}}=\min\{\|\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}\|_{\mathbf{H}};\ \mathbf{x}\in\mathbf{x}_0+\mathcal{K}_i\}$ 若 $0\notin W_{\mathbf{H}}(\mathbf{AH})$。

采用$\mathbf{H}$ 右预条件并通过$\mathbf{W}$ $=\mathbf{H}$ 加权的 WP-GCR 等价于采用$\mathbf{H}$ 左预条件并通过 $\mathbf{W}$ $=\mathbf{H}^{-1}$加权的 WP-GCR。因此，不再区分左预条件和右预条件。在 [35], 类似地，对于由问题矩阵$\mathbf{A}$的对称部分产生的内积，也可以观察到这种等价性。

定理 5 (WHP-GCR 的收敛性)。 假设算子 $\mathbf{A}$ $\in\mathbb{K}^{n\times n}$ 非奇异。另假设预条件子 $\mathbf{H}$ $\in\mathbb{K}^{n\times n}$ 是厄米特正定的，并且在由 $\mathbf{H}$诱导的内积中应用右预条件 *GCR*。 *i*算法 *3* 的第*3*次迭代期</*final*

算法 3WHP-GCR (即，WP-GCR使用厄米特正定 $\mathbf{H}$ 和$\mathbf{W} = \mathbf{H}$)

要求： $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$

$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$

$\mathbf{z}_0 = \mathbf{H}\mathbf{r}_0$

$\mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0$

$\mathbf{q}_0 = \mathbf{A}\mathbf{p}_0$

$\mathbf{y}_0 = \mathbf{H}\mathbf{q}_0$

对于 $i = 0$，1，.....，收敛 **执行**

$\delta_i = \langle \mathbf{y}_i, \mathbf{q}_i \rangle$; $\gamma_i = \langle \mathbf{q}_i, \mathbf{z}_i \rangle$; $\alpha_i = \gamma_i / \delta_i$

$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$

$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{q}_i$

$\mathbf{z}_{i+1} = \mathbf{z}_i - \alpha_i \mathbf{y}_i$

$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}_{i+1}$

$\mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{A}\mathbf{z}_{i+1}$

对 $j = 0, \ldots, i$ **执行**

$\Phi_{i,j} = \langle \mathbf{y}_j, \mathbf{q}_{i+1} \rangle$; $\beta_{i,j} = \Phi_{i,j} / \delta_j^{-1}$

$\mathbf{p}_{i+1} -= \sum_{j=0}^{i} \beta_{i,j}$**段落**$_j$

$\mathbf{q}_{i+1} -= \sum_{j=0}^{i} \beta_{i,j} \mathbf{q}^j$

结束循环

$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{H}\mathbf{q}_{i+1}$

结束 for

return $\mathbf{x}_{i+1}$

满足

$$\frac{\|\mathbf{r}_{i+1}\|_{\mathbf{H}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{H}}} \le \left[1 - \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A}^{-1})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \times \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}\right]^{i/2}. \tag{13}$$

对于 *WHP-GCR* 和 *WHP-* 广义最小残量法的所有截断版本和重启版本，同样的结论也成立，包括 *WHP-MR*（即带有 $\mathbf{W} = \mathbf{H}$ 厄米特正定的 *WP-MR*）。

证明。 将定理 3 应用于 WHP-GCR，必须加以界定的量可改写为

$$\begin{aligned}
\inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle_{\mathbf{H}}|^2}{\|\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y}\|_{\mathbf{H}}^2 \|\mathbf{y}\|_{\mathbf{H}}^2} &= \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{H}\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|^2}{\langle \mathbf{H}\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y}\rangle\langle \mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \\
&= \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|^2}{\langle \mathbf{H}\mathbf{A}\mathbf{y},\mathbf{A}\mathbf{y}\rangle\langle \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \ (\text{by } \mathbf{y} \leftarrow \mathbf{H}\mathbf{y}) \\
&\ge \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}\mathbf{A}\mathbf{y},\mathbf{A}\mathbf{y}\rangle} \times \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \\
&= \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \times \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{A}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \ (\text{by } \mathbf{y} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{y}) \\
&\ge \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A}^{-1})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \times \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}
\end{aligned}$$

其中，M(A) 和 M(A^{-1}) 分别是 A 和 A^{-1} 的厄米部分（如式 (2) 中所引入），且对于任意矩阵 $B \in \mathbb{K}^{n\times n}$，$|\langle By, y\rangle| \ge |\mathrm{Re}(\langle By, y\rangle)| = |\langle M(B)y, y\rangle|$。 □

4.2 正定 A

假设问题矩阵 $\mathbf{A}$ 是正定的，即，$\mathbf{M(A)}$ 是厄米特正定的，前一段的计算可继续进行:

$$\begin{aligned}
\inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{\langle \mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle_{\mathbf{W}}^2}{\|\mathbf{A}\mathbf{H}\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}^2 \|\mathbf{y}\|_{\mathbf{W}}^2} &\ge \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A}^{-1})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|} \times \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \\
&\qquad \times \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{|\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle|}{\langle \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \\
&\ge \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A}^{-1})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \times \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}{\langle \mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} \\
&\qquad \times \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}{\langle \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle},
\end{aligned}$$

其中除以 $\langle \mathbf{M(A)}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle$ 时分母不为零，且去掉绝对值不会改变结果。事实上，由于 [21][第 10]，页上的性质 (1.6) 表明$\mathbf{A}^{-1}$ 正定，因此$\mathbf{A}^{-1}$ 定义良好，且$\mathbf{M(A}^{-1})$ 也正定。

令 $\lambda_{\min}\mathbf{(HM(A))}$ 和 $\lambda_{\max}\mathbf{(HM(A))}$ 分别表示$\mathbf{HM(A)}$ 的最小和最大特征值。$\mathbf{HM(A)}$ 的特征值同时也是广义特征值问题 $\mathbf{M(A)HM(A)y} = \lambda\mathbf{M(A)y}$ 和 $\mathbf{HM(A)Hy} = \lambda\mathbf{Hy}$的特征值。根据特征值的 Rayleigh-Ritz 刻画，可以解释乘积中的后两项:

$$\inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}{\langle \mathbf{H}^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} = \inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{\langle \mathbf{H}\mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}{\langle \mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} = \lambda_{\min}(\mathbf{H}\mathbf{M}(\mathbf{A})).$$

and

$$\inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}{\langle \mathbf{H}\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle} = \left(\sup_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{H}\mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}\right)^{-1} = \frac{1}{\lambda_{\max}(\mathbf{H}\mathbf{M}(\mathbf{A}))},$$

对于剩余项，回顾（2）可知，$\mathbf{N(A)}$ 表示反厄米部分
of $\mathbf{A}$，下面是一个非常有用的结果。

引理 1 ([23], 另见 [22, 21])。 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^n$ 为正定且$c \in \mathbb{R}$。矩阵 $c\mathbf{M}(\mathbf{A}^{-1}) - \mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}$ 正定，当且仅当 $c > 1 + \rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A}))^2$, 满足

$$\rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A})) = \max\{|t_j|;\ \pm it_j \text{ are the eigenvalues of } \mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A})\}.$$

该引理的一个等价改述是

$$\inf_{\mathbf{y}\neq 0} \frac{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A}^{-1})\mathbf{y}, \mathbf{y}\rangle}{\langle \mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{y}, \mathbf{y}\rangle} = [1 + \rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A}))^2]^{-1}. \tag{14}$$

根据定义， $\rho\mathbf{(M(A)^{-1}N(A))}$ 是 $\mathbf{M(A)^{-1}N(A)}$ 的谱半径，即范数最大的特征值的范数。在这一特定情况下，$\mathbf{(M(A)^{-1}N(A))}$ 的特征值是成对出现的纯虚共轭数 $\pm i|t_j|$；当 $\mathbf{A}$ 的阶为奇数时，还包括 0。

综上所述，我们得到：

定理6 （正定 $\mathbf{A}$ 的 WHP-GCR 收敛性）。 假设算子 $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n\times n}$ 为正定。另假设预条件子 $\mathbf{H} \in \mathbb{K}^{n\times n}$ 为厄米特正定，且在由 $\mathbf{H}$ 诱导的内积下应用右预条件 *GCR*。算法 *i3* 的第 *3* 次迭代满足

$$\frac{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{H}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{H}}} \leq \left[1 - \frac{\lambda_{\min}(\mathbf{HM}(\mathbf{A}))}{\lambda_{\max}(\mathbf{HM}(\mathbf{A}))} \times \frac{1}{1 + \rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A}))^2}\right]^{i/2}. \tag{15}$$

对于 *WHP-GCR* 和 *WHP*-广义最小残量法的所有截断及重启版本，包括 *WHP-MR*，同样的结果也成立。

定理中的估计将残量界拆分为两个部分：

- $\mathbf{A}$ 的厄米部分经$\mathbf{H}$预条件后的条件数，
- $\mathbf{A}$ 的非厄米性强度度量，该度量独立于$\mathbf{H}$。

推论 2. 在定理 *6* 的假设下，若$\mathbf{H}$ 是 $\mathbf{M}(\mathbf{A})$ 的预条件子，且预条件算子的条件数为 $\kappa(\mathbf{HM}(\mathbf{A}))$，则

$$\frac{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{H}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{H}}} \leq \left[1 - \frac{\kappa(\mathbf{HM}(\mathbf{A}))^{-1}}{1 + \rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A}))^2}\right]^{i/2}. \tag{16}$$

对于 *WHP-GCR* 和*WHP*-广义最小残量法的所有截断和重启版本，包括*WHP-MR*，均有相同的结果。

特别地，如果$\mathbf{H}$ 是一个区域分解预条件子，使得 $\kappa\mathbf{(HM(A))}$ 可以独立于子域的数量进行界定，那么上述收敛界也不依赖于子域的数量。换言之，如果对于 $\mathbf{A}$ 的厄米部分已知一种可扩展的区域分解方法，那么针对非厄米问题所提出的算法也是可扩展的。对于许多源于 PDE 离散化的问题，$\mathbf{M(A)}$ 来源于一个阶数低于产生 $\mathbf{N(A)}$ 的微分算子，因此 $\rho\mathbf{(M(A)^{-1}N(A))}$ 独立于离散步长有界（这一观察已在 [46] 和 [14][第 10] 节的不同背景下提出）。如果$\mathbf{H}$ 还可以选择为使预条件化的厄米部分独立于 h 而具有良好条件，那么残量界将独立于 h。

接下来将说明，WHP-GCR 对轻度非厄米问题是有效的。如果预条件子选择得当，该算法具有可扩展性和最优性（即收敛性不依赖于离散步长）。

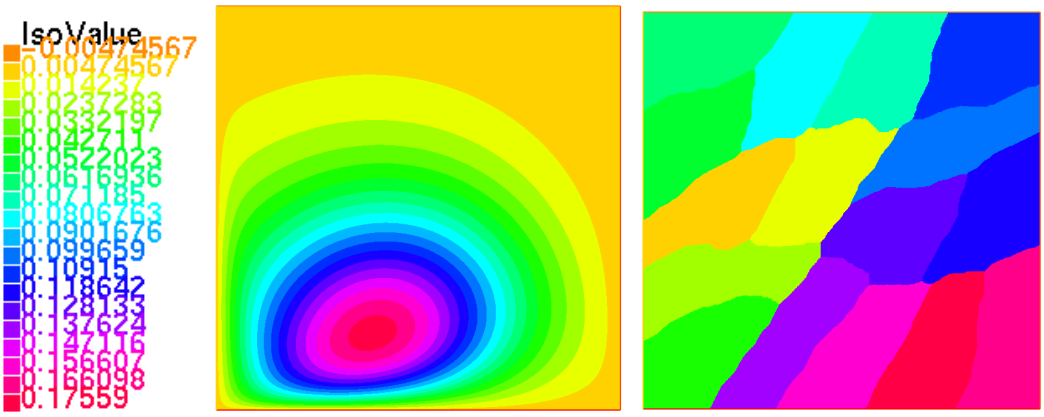


图 1：左：$c_0 = \nu = 0.1$的解。右：由 Metis 计算得到的划分为 $N = 16$ 个子域。

5 示例：对流-扩散-反应

本节考虑定义在 Ω 上的对流-扩散-反应问题 $= [0,1]^2$。这是一个实值问题（$\mathbb{K} = \mathbb{R}$），因此厄米意味着对称。本文的阐述、记号和测试案例参考了 [3, 4]。该问题的强形式为：

$$\begin{aligned} c_0 u + \operatorname{div}(\mathbf{a}u) - \operatorname{div}(\nu \nabla u) &= f \text{ in } \Omega, \\ u &= 0 \text{ on } \partial\Omega. \end{aligned}$$

变分形式为：求 $u \in H_0^1(\Omega)$，使得

$$\underbrace{\int_\Omega \left(\left(c_0 + \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{a} \right) uv + \nu \nabla u \cdot \nabla v \right)}_{\text{symmetric part}} + \int_\Omega \left(\frac{1}{2} \mathbf{a} \cdot \nabla uv - \frac{1}{2} \mathbf{a} \cdot \nabla vu \right) = \int_\Omega fv,$$

对于所有 $v \in H_0^1(\Omega)$。

右端项和对流场选取为

$$f(x,y) = \exp(-10((x-0.5)^2 + (y-0.1)^2)) \text{ and } \mathbf{a}(x,y) = 2\pi[-(y-0.1), x-0.5].$$

反应系数 $c_0 > 0$ 和黏度 $\nu > 0$ 在Ω上取为常数。结合div a $= 0$，c_0 和 ν 的正性确保 A 是正定的。在Ω 内改变c_0 和 ν 不会造成任何额外困难，因为所提出的预条件子能够处理非均匀的 c_0 和 ν（在厄米部分中）。该问题通过特征长度为 h 的规则三角形网格上的拉格朗日 $\mathbb{P}_1$ 有限元进行离散。WHP-GCR 算法在FreeFem++ [20] 中使用 ffddm 库 [44]实现。除一个情况（另有说明）外，WHP-GCR 的所有迭代次数均对应于从零初始猜测出发达到 $\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{H}} < 10^{-6}\|\mathbf{b}\|_{\mathbf{H}}$ 所需的迭代次数。狄利克雷边界条件通过罚法施加。在具有 501×501 个自由度（dof）的网格上通过直接求解得到的解，针对 $c_0 = \nu = 0.1$的不同取值绘制于图 1（左）中。

令 **M(A)**为与该问题的对称部分离散化相对应的矩阵。**M(A)** 通过加性 Schwarz 区域分解进行预条件处理

采用 GenEO 粗空间的方法 [38, 39]。将 Ω 划分为 N 子域 Ω^s的过程由 Metis 自动完成。每个 Ω 都添加一层重叠^s。令$\mathbf{R}^{s\top}$ $(s = 1, \ldots, N)$ 表示将局部有限元函数（定义在 Ω^s上）通过零延拓到整个 Ω 上，则预条件子可写为:

$$\mathbf{H} = \mathbf{\Pi} \sum_{s=1}^{N} \mathbf{R}^{s\top} \underbrace{(\mathbf{R}^s \mathbf{M}(\mathbf{A}) \mathbf{R}^{s\top})^{-1}}_{\text{local solves}} \mathbf{R}^s \mathbf{\Pi}^\top + \mathbf{R}^{0\top} \underbrace{(\mathbf{R}^0 \mathbf{M}(\mathbf{A}) \mathbf{R}^{0\top})^{-1}}_{\text{coarse solve}} \mathbf{R}^0,$$

其中 $\mathbf{\Pi} = \mathbf{I} - \mathbf{R}^{0\top}(\mathbf{R}^0\mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{R}^{0\top})^{-1}\mathbf{R}^0\mathbf{M}(\mathbf{A})$ 是粗空间投影算子（也称为消去算子），而 $\mathbf{R}_0^\top$ 中的向量张成粗空间（或消去空间）。GenEO 的特点是，通过在每个子域中求解广义特征值问题的低频特征模态来构造粗向量。用户提供一个阈值 $\tau > 0$，例如，$\tau = 0.15$。相应的 ffddm 选项为

-FFDDM_Schwarz_方法 asm
-FFDDM_GenEO_阈值 0.15
-ffddm_施瓦茨_粗网格_校正 BNN。
所得预条件算子的条件数有界于

$$\kappa(\mathbf{H}\mathbf{M}(\mathbf{A})) \leq k_0 \left(1 + \frac{k_0}{\tau}\right),$$

其中 k_0 表示每个网格单元所属子域的最大数量[36][定理4。40]。该常数与子域的总数无关 N。在所有示例中，τ 均设置为 0。15。作为示例，Metis 提供的划分为 $N = 16$个子域，如图 1 （右）所示。对于这种情况，有$k_0 = 3$。因此，该问题预条件对称部分的条件数的上界为 κ（HM（A））$\leq 3\,(1 + 3/0.15) = 63$。将其代入定理 6给出的界中，可得 WHP-GCR 或 WHP-GMRES 产生的残量满足

$$\frac{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{H}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{H}}} \leq \left[1 - \frac{0.016}{1 + \rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A}))^2}\right]^{i/2}.$$

例如，若 $\rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A})) \leq 1$，则该界给出

$$\frac{\|\mathbf{r}_i\|_{\mathbf{H}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{H}}} \leq \sqrt{\left[1 - \frac{1}{126}\right]}^{\,i} = 0.996^i; \quad \frac{\|\mathbf{r}_{500}\|_{\mathbf{H}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{H}}} \leq 0.14 \text{ and } \frac{\|\mathbf{r}_{3468}\|_{\mathbf{H}}}{\|\mathbf{r}_0\|_{\mathbf{H}}} < 1.0 \cdot 10^{-6}.$$

残量保证在每次迭代中仅减少0。4%。如前文所述，对于完全正交化的 WP-GCR和 WP-GMRES，该界限较为悲观，我们预计在实际中会观察到残量更快地减少。

的值 $\rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A}))$ 还需要考虑 $\rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A}))$ 的值。在 [3][引理 4.5], 的证明中，通过柯西-施瓦茨不等式和一些算术恒等式，证明了

$$\langle \mathbf{y}, \mathbf{N}(\mathbf{A})\mathbf{x} \rangle \leq \alpha \|\mathbf{x}\|_{\mathbf{M}(\mathbf{A})} \|\mathbf{y}\|_{\mathbf{M}(\mathbf{A})}, \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n.$$

与 $\alpha = \frac{1}{2} - \frac{\|\mathbf{a}\|_{L^\infty(\Omega)}}{\sqrt{\inf(\nu)}} c_0 + \frac{1}{2}\inf(\operatorname{div}(\mathbf{a}))$。因此，对于$\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$，有

$$\begin{aligned} \|\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A})\mathbf{x}\|_{\mathbf{M}(\mathbf{A})}^2 &\leq \alpha \langle \mathbf{x}, \mathbf{M}(\mathbf{A})\mathbf{x} \rangle^{1/2} \langle \mathbf{N}(\mathbf{A})\mathbf{x}, \mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A})\mathbf{x} \rangle^{1/2} \\ &= \alpha \|\mathbf{x}\|_{\mathbf{M}(\mathbf{A})} \|\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A})\mathbf{x}\|_{\mathbf{M}(\mathbf{A})}. \end{aligned}$$

离散步长 h	1/500	1/200	1/30	1/10
$\rho(\mathbf{M(A)}^{-1}\mathbf{N(A)})$	0.3391	0.3389	0.3380	0.3136

表 1：离散步长 h 变化时 $\rho(\mathbf{M(A)}^{-1}\mathbf{N(A)})$ 的计算。情形 $\nu = c_0 = 1$。

子域数量	4	8	16	32
$h = 1/200$ 的迭代次数	19	20	20	20
$h = 1/500$ 的迭代次数	18	18	19	20

表 2：可扩展性。每行中，随着子域数量增加，求解的是同一个问题。迭代次数保持不变。情况 $\nu = c_0 = 1$。

矩阵的谱半径由其任一自然范数从上方界定，特别是由$\mathbf{M(A)}$所诱导的范数界定，由此立即可得

$$\rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A})) \leq \|\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A})\|_{\mathbf{M}(\mathbf{A})} \leq \frac{1}{2}\frac{\|\mathbf{a}\|_{L^\infty(\Omega)}}{\sqrt{\inf(\nu)\inf(c_0 + \frac{1}{2}\operatorname{div}(\mathbf{a}))}}. \tag{17}$$

界（17）关于 $\rho(\mathbf{M}(\mathbf{A})^{-1}\mathbf{N}(\mathbf{A})$ ）不依赖于离散步长 h 因此整体收敛界也不依赖于它。

在表 1中，给出了在 $c_0 = \nu = 1$ 的情况下，由Octave 的 eigs计算得到的 ρ(M(A)$^{-1}$ N(A))的实际值。离散步长在 $h = 1/10$ 和 $h = 1/200$ 之间变化，而 ρ(M(A)$^{-1}$N(A)) 仅在 0.31 和 0.34之间变化。相比之下，界(17)给出ρ(M(A)$^{-1}$N(A)) ≤ 3.23。该界约为所计算谱半径的 10 倍。

可扩展性（表 2）由于采用 GenEO 粗空间的加性施瓦茨具有可扩展性，因此已证明整体算法具有可扩展性。我们通过将同一问题划分为不同数量的子域（均由 Metis 计算）来求解，以此进行验证。考虑了两种离散化： $h = 1/200$ 和 $h = 1/500$。对于此测试 $\nu = c_0 = 1$。观察结果表明，该方法确实具有可扩展性：表 2中报告的迭代次数不受子域数量影响。观察到其依赖于 h ，下一节将对此进行研究。

对 h （表 3）研究了离散步长 h 对迭代次数的影响，见表 3。分区设置为 $N = 8$ 个子域。对于 $c_0 = \nu$ 的三个不同取值，网格尺寸 h 在 $1/100$ 和 $1/2000$之间变化。可以观察到，正如理论所预测的那样，当 h 变化时，迭代次数几乎保持不变。

	$1/h$	2000	1000	500	200	100
	# 自由度 (n)	4 004 001	1 002 001	251 001	40 401	10 201
$c_0 = \nu = 10$	它。计数	16	16	17	17	20
$c_0 = \nu = 1$	它。计数	17	18	19	20	21
$c_0 = \nu = 0.1$	它。计数	39	40	42	43	41

T表3：对网格尺寸的依赖 h。每行对应一个 (ν， c_0) 值。

$c_0 = \nu$	0.001	0.01	0.1	1	10	仅对称部分
迭代次数	> 500 （ $1.1 \cdot 10^{-4}$）	161	42	19	17	17

表4：对称项和反对称项相对重要性的影响。 $N = 8$ 个子域的情况，以及 $h = 1/500$。括号中的值对应于算法在 500 次迭代后停止时的相对残量 $\|\mathbf{r}_{500}\|_{\mathbf{H}}/\|\mathbf{b}\|_{\mathbf{H}}$ 。

情况 $\nu = c_0 = 1$

子域数量	4	8	16	32
广义最小残量法	24	25	26	26
WHP-GCR（欧几里得停止准则）	25	26	26	27

案例 $\nu = c_0 = 0.1$

子域数量	4	8	16	32
广义最小残量法	52	52	53	52
WHP-GCR（欧几里得停止准则）	53	53	55	53

表5：内积的影响：比较采用欧几里得范数的广义最小残量法与 WHP-GCR。两种算法均采用欧几里得范数停止准则。情形 $h = 1/500$。子域数量 N 有所变化，并考虑两种情形： $\nu = c_0 = 1$ 和 $\nu = c_0 = 0.1$。

对非对称性强度的依赖（表4）对于这项测试， h =1/500 和 $N = 8$。对 ν 和 c_0 进行变化，并在表4中报告相应的迭代次数。当对称部分占主导时，问题收敛得非常快；否则收敛速度较慢。这是算法设计所预期的结果。

欧几里得内积下的广义最小残量法（表 5）此前已经观察到，在广义最小残量法中改变内积对其收敛性的影响不大 [35, 6]。针对 $h = 1/500$ 在两种设置下 $\nu = c_0 = 1$ 和 $\nu = c_0 = 10$进行了可扩展性测试。子域数量在 4 到 32 之间变化。采用与之前相同的预条件子，运行两种算法：右预条件 GMRES 和 WHP-GCR。不同之处在于，GMRES 使用欧几里得内积，而 WHP-GCR（其产生的迭代点与 WHP-GMRES 相同）使用$\mathbf{H}$-内积。两种算法的停止准则均设为 $\|\mathbf{r}_i\| < 10^{-6}\|\mathbf{b}\|$ ，其中范数为欧几里得范数。值得注意的是，表5报告的迭代次数几乎完全相同。这意味着在实践中，使用厄米正定预条件子和欧几里得范数很可能会得到与所建立的理论一致的结果。其优点是，如果已经有可用的 GMRES，就无需费力实现 WHP-GCR。与 GCR（或 GMRES）相比，运行 WHP-GCR 的额外开销很小，因为每次迭代只需额外存储一个（或两个）向量。

与非对称预条件子的比较 最后，我们比较对称预条件与非对称预条件。由于 WHP-GCR 无法与非对称预条件子配合使用，因此本次比较采用 GMRES 求解器。停止准则仍设为 $\|\mathbf{r}_i\| < 10^{-6}\|\mathbf{b}\|$。非对称预条件子选用单层加性 Schwarz 方法。为确保比较公平，我们还采用与 $\mathbf{M}(\mathbf{A})$ 对应的对称单层加性 Schwarz 预条件子进行预处理。最后，我们还纳入了此前所有测试中使用的双层对称预条件子。结果列于表 6。当问题

$c_0 = \nu$	0.01	0.1	1	10	仅对称部分
非对称单层	35	68	81	81	×
对称单层	> 200	105	87	84	81
对称双层	191	52	25	23	24

表6：广义最小残量法迭代次数。将单层非对称预条件子与单层对称预条件子和双层对称预条件子进行比较。 $N = 8$子域和 $h = 1/500$的情况。

非对称预条件				
	8 个子域		16 个子域	
	$h = 1/500$	$h = 1/1000$	$h = 1/500$	$h = 1/1000$
$c_0 = \nu = 0.01$	35	58	47	67
$c_0 = \nu = 0.1$	68	96	82	113

表 7：使用非对称单层加性施瓦茨预条件器时广义最小残量法的迭代次数。子域数量增加或网格尺寸 h减小时，收敛性会变差。

变得明显非对称时（$c_0 = \nu \geq 0.1$），与单层对称预条件子相比，非对称预条件子具有明显优势。对于$c_0 = \nu = 0.01$，单层非对称预条件子的收敛速度甚至远快于双层对称预条件子。这并不十分令人意外，因为对流项完全没有被对称预条件子考虑在内。不过需要注意的是，当 N 增大且 h 减小时（图 7对此作了简要说明），这种非对称预条件子的效果会变差。

6 结论

本文研究了广义最小残量法、GCR及其截断版和重启版的收敛性。预条件子和内积的影响已得到明确阐述。文中提出，即使对于非厄米问题，也可以应用厄米正定预条件子 **H**。然后，可以在**H** 内积下应用广义最小残量法或 GCR。这被称为 WHP-GMRES。对于 **A** 为正定的情形，证明了一个新的收敛结果。收敛界中的两个项分别是厄米部分经 **H** 预条件后的条件数，以及$\mathbf{M(A)^{-1}N(A)}$的谱半径。后一项可以看作非厄米性的强度度量。它不依赖于预条件子的选择。一个具体应用是**H** 为区域分解预条件子的情形。如果应用于**A** 的厄米部分的预条件子能产生可扩展方法，那么 WHP-GCR 也将具有可扩展性。对于对流-扩散-反应问题，还证明了只要预条件后的对称部分的条件数不依赖于网格尺寸 h ，收敛性也将不依赖于网格尺寸 h。数值结果证实了这些发现。对于问题强烈非厄米或不定的情形，算法仍有待改进。

WHP-GCR 的一种实现

算法4和 5 提出了 WHP-GCR 的两种替代实现（算法3），所需的存储空间不超过通常的 GCR 算法。

此表示法 ˜ 用于强调带波浪号的向量不会被正交化和保存。在精确算术中，所有三个版本都会产生相同的迭代结果。欧几里得残量$\mathbf{r}_i$ 在算法4中不会更新，这可能是一个缺点。在有限精度下，由未显式正交化的向量计算 α_i 可能会导致精度损失。因此，数值结果部分重点介绍并实现了算法3 。

算法 4 替代 WHP-GCR

要求： $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$

$\mathbf{z}_0 = \mathbf{H}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0)$

$\mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0$

$\tilde{\mathbf{q}}_0 = \mathbf{A}\mathbf{p}_0$

$\mathbf{y}_0 = \mathbf{H}\tilde{\mathbf{q}}_0$

对于 $i = 0, 1, \ldots\ldots,$ 收敛**执行**

$\delta_i = \langle \mathbf{y}_i, \tilde{\mathbf{q}}_i \rangle; \quad \gamma_i = \langle \tilde{\mathbf{q}}_i, \mathbf{z}_i \rangle$

$\alpha_i = \gamma_i / \delta_i$

$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$

$\mathbf{z}_{i+1} = \mathbf{z}_i - \alpha_i \mathbf{y}_i$

$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}_{i+1}$

$\tilde{\mathbf{q}}_{i+1} = \mathbf{A}\mathbf{z}_{i+1}$

$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{H}\tilde{\mathbf{q}}_{i+1}$

对于 $j = 0, \ldots, i$ **执行**

$\Phi_{i,j} = \langle \mathbf{y}_j, \tilde{\mathbf{q}}_{i+1} \rangle$

$\beta_{i,j} = \Phi_{i,j} / \delta_j$

结束循环

$\mathbf{p}_{i+1} -= \sum_{j=0}^{i} \beta_{i,j} \mathbf{p}_j$

$\mathbf{y}_{i+1} -= \sum_{j=0}^{i} \beta_{i,j} \mathbf{y}_j$

结束循环

返回 $\mathbf{x}_{i+1}$

算法 5 替代 WHP-GCR

要求： $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$

$\mathbf{z}_0 = \mathbf{H}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0)$

$\mathbf{p}_0 = \mathbf{z}_0$

$\mathbf{q}_0 = \mathbf{A}\mathbf{p}_0$

$\tilde{\mathbf{y}}_0 = \mathbf{H}\mathbf{q}_0$

对于 $i = 0, 1, \ldots\ldots,$ 收敛**执行**

$\delta_i = \langle \tilde{\mathbf{y}}_i, \mathbf{q}_i \rangle; \quad \gamma_i = \langle \mathbf{q}_i, \mathbf{z}_i \rangle$

$\alpha_i = \gamma_i / \delta_i$

$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$

$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{q}_i$

$\mathbf{z}_{i+1} = \mathbf{z}_i - \alpha_i \mathbf{y}_i$

$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}_{i+1}$

$\mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{A}\mathbf{z}_{i+1}$

$\tilde{\mathbf{y}}_{i+1} = \mathbf{H}\mathbf{q}_{i+1}$

对于 $j = 0, \ldots, i$ **执行**

$\Phi_{i,j} = \langle \tilde{\mathbf{y}}_j, \mathbf{q}_{i+1} \rangle$

$\beta_{i,j} = \Phi_{i,j} / \delta_j$

结束 for 循环。

$\mathbf{p}_{i+1} -= \sum_{j=0}^{i} \beta_{i,j} \mathbf{p}_j$

$\mathbf{q}_{i+1} -= \sum_{j=0}^{i} \beta_{i,j} \mathbf{q}_j$

结束 for

返回 $\mathbf{x}_{i+1}$

参考文献

[1] Z.-Z. Bai, G. H. Golub, and M. K. Ng, 非厄米正定线性系统的厄米-反厄米分裂方法，*SIAM* 矩阵分析与应用杂志，*24*（*2003*），第 *603–626* 页，*https://doi.org/10.1137/S0895479801395458*.[2] B. Beckermann, S. A. Goreinov, and E. E. Tyrtyshnikov, 关于广义最小残量法的埃尔曼估计的几点说明，*SIAM* 矩阵分析与应用杂志，*27*（*2006*），第 *772–778* 页，*https://doi.org/10.1137/040618849*.[3] M. Bonazzoli, X. Claeys, F. Nataf, and P.-H. Tournier, 非自伴或不定问题的 *SO-RAS* 区域分解预条件子的分析，科学计算杂志，*89*（*2021*），第 *27* 页，*https://doi.org/10.1007/s10915-021-01631-8*。编号/第 *19* 期.[4] M. Bonazzoli, X. Claeys, F. Nataf, and P.-H. Tournier, 分割统一性如何影响 *SORAS* 预条件子？工作论文或预印本，*2022* 年 *12* 月，*https://hal.science/hal-03882577*.[5] N. Bootland, V. Dolean, I. G. Graham, C. Ma, and R. Scheichl, 非均匀不定椭圆问题的 *GenEO* 粗空间，*arXiv* 预印本 *arXiv:2103.16703*，（*2021*），*https://doi.org/10.48550/ARXIV.2103.16703*.[6] N. Bootland, V. Dolean, I. G. Graham, C. Ma, and R. Scheichl, 面向不定和非自伴问题的 *GenEO* 粗空间重叠 *Schwarz* 方法，*IMA* 数值分析杂志，*43*（*2023*），第 *1899–1936* 页，*https://doi.org/10.1093/imanum/drac036*.[7] X.-C. Cai, 非自伴椭圆和抛物型偏微分方程的若干区域分解算法，博士论文，纽约大学，*1989*，*https://archive.org/details/somedomaindecomp00caix/page/70/mode/2up*.[8] X.-C. Cai, W. D. Gropp, and D. E. Keyes, 非对称椭圆问题若干区域分解算法的比较，载于第五届偏微分方程区域分解方法国际研讨会，费城，宾夕法尼亚州，*1992*.[9] X.-C. Cai and O. B. Widlund, 不定椭圆问题的区域分解算法，*SIAM* 科学与统计计算杂志，*13*（*1992*），第 *243–258* 页，*https://doi.org/10.1137/0913013*.[10] J. G. Calvo and O. B. Widlund, *BDDC* 区域分解算法原始约束的自适应选取，电子数值分析汇刊，*45*（*2016*），第 *524–544* 页.[11] T. F. Chan, E. Chow, Y. Saad, and M. C. Yeung, 在预条件 *Krylov* 子空间方法中保持对称性，*SIAM* 科学计算杂志，*20*（*1999*），第 *568–581* 页，*https://doi.org/10.1137/S1064827596311554*.[12] M. Eiermann and O. G. Ernst, *Krylov* 子空间方法理论的几何方面，数值学报，*10*（*2001*），第 *251–312* 页，*https://doi.org/10.1017/S0962492901000046*.[13] S. C. Eisenstat, H. C. Elman, and M. H. Schultz, 非对称线性方程组的变分迭代方法，*SIAM* 数值分析杂志，*20*（*1983*），第 *345–357* 页，*https://doi.org/10.1137/0720023*.[14] H. C. Elman, 大型稀疏非对称线性方程组的迭代方法，博士论文，耶鲁大学，*1982*.[15] A. Essai, 求解非对称线性系统的加权 *FOM* 和广义最小残量法，数值算法，*18*（*1998*），第 *277–292* 页，*https://doi.org/10.1023/A:1019177600806*。

[16] I. G. Graham, E. A. Spence, and E. Vainikko, 含吸收项的高频亥姆霍兹问题的区域分解预处理, *Math. Comput., 86 (2017), pp. 2089–2127, https://doi.org/10.1090/mcom/3190.*[17] I. G. Graham, E. A. Spence, and J. Zou, 含吸收项亥姆霍兹方程的局部阻抗条件区域分解, *SIAM J. Numer. Anal., 58 (2020), pp. 2515–2543, https://doi.org/10.1137/19M1272512.*
[18] S. Güttel and J. Pestana, 关于加权广义最小残量法的一些观察, *Numer. Algorithms, 67 (2014), pp. 733–752, https://doi.org/10.1007/s11075-013-9820-x, strathprints.strath.ac.uk/54749/.*[19] R. Haferssas, P. Jolivet, and F. Nataf, *Lions*算法及对称化优化限制加性施瓦茨方法的加性施瓦茨方法类型理论, *SIAM J ournal on Scientific Computing, 39 (2017), pp. A1345–A1365.*[20] F. Hecht, *FreeFem*的新进展++, *J. Numer. Math., 20 (2012), pp. 251–265, https://freefem.org/.*
[21] C. R. Johnson, 厄米部分为正定的矩阵, 博士论文, *California Institute of Technology, 1972.*[22] C. R. Johnson, 关于对称部分正定矩阵的一个不等式, *Linear Algebra Appl., 6 (1973), pp. 13–18, https://doi.org/10.1016/ 0024-3795(73)90003-7.*
[23] C. R. Johnson, 关于实部正定的复矩阵的不等式, *Trans. Am. Math. Soc., 212 (1975), pp. 149–154, https://doi.org/10.2307/ 1998618.*[24] P. Jolivet, F. Hecht, F. Nataf, and C. Prud'homme, 用于非均匀椭圆问题的可扩展区域分解预条件子，载于 *SC '13*：国际高性能计算、网络、存储与分析会议论文集，*2013*，*pp. 1–11, https://doi.org/10.1145/2503210.2503212.*[25] A. Klawonn, M. Kuhn, and O. Rheinbach, 三维问题中 *FETI-DP* 的自适应粗空间, *SIAM Journal on Scientific Computing, 38 (2016), pp. A2880– A2911.*
[26] A. Klawonn and G. Starke, 非对称鞍点问题的块三角预条件子：数值域分析, *Numer. Math., 81 (1999), pp. 577– 594, https://doi.org/10.1007/s002110050405.*
[27] J. Liesen and Z. Strakoš, *Krylov*子空间方法：原理与分析, *Nu- mer. Math. Sci. Comput., Oxford: Oxford University Press, 2013*年精装版重印，*2015, https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780199655410. 001.0001.*
[28] J. Liesen and P. Tichý, 理想广义最小残量法的数值域界, *arXiv*预印本 *arXiv:1211.5969, (2012), https://doi.org/10.48550/ARXIV.1211.5969.*
[29] G. Meurant and J. D. Tebbens, 特征值在非正规矩阵广义最小残量法残量范数形成中的作用, *Numer. Algorithms, 68 (2015), pp. 143– 165, https://doi.org/10.1007/s11075-014-9891-3.*[30] N. M. Nachtigal, S. C. Reddy, and L. N. Trefethen, 非对称矩阵迭代有多快？, *SIAM J. Matrix Anal. Appl., 13 (1992), pp. 778–795, https://doi.org/10.1137/0613049.*
[31] C. Pechstein and C. R. Dohrmann, 自适应 *BDDC* 的统一框架, *Electron. Trans. Numer. Anal, 46 (2017), p. 3.*

[32] J. Pestana and A. J. Wathen, 非厄米特矩阵最小残差方法的预条件子选择, *J. Comput. Appl. Math., 249 (2013), pp. 57–68, https://doi.org/10.1016/j.cam.2013.02.020.*[33] Y. Saad, 稀疏线性系统的迭代方法。, 费城, *PA: SIAM*工业与应用数学学会，第*2*版，*2003.*[34] Y. Saad and M. H. Schultz, *GMRES*：求解非对称线性系统的广义最小残差算法 , *SIAM J. Sci. Stat. Comput., 7 (1986), pp. 856–869, https://doi.org/10.1137/0907058.*
[35] M. Sarkis and D. B. Szyld, 采用欧几里得范数和能量范数的最小残差方法的最优左、右加性施瓦茨预处理, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 196 (2007), pp. 1612–1621, https://doi.org/10.1016/ j.cma.2006.03.027.*[36] N. Spillane, 对称正定问题的稳健区域分解方法, 博士论文, *UPMC, 2014, http:// www.theses.fr/2014PA066005/ document.*[37] N. Spillane, 基于 *genEO* 族粗空间的区域分解方法抽象理论, *arXiv*预印本, *(2021), https://doi.org/10.48550/ARXIV. 2104.00280.*[38] N. Spillane, V. Dolean, P. Hauret, F. Nataf, C. Pechstein, and R. Sche-ichl, 偏微分方程组的稳健两层区域分解预条件子, *C. R. Math. Acad. Sci. Paris, 349 (2011), pp. 1255–1259, https://doi.org/10. 1016/j.crma.2011.10.021.*
[39] N. Spillane, V. Dolean, P. Hauret, F. Nataf, C. Pechstein, and R. Sche-ichl, 通过重叠区域中的广义特征值问题构造偏微分方程组的抽象稳健粗空间, *Numer. Math., 126 (2014), pp. 741–770, https://doi.org/10.1007/ s00211-013-0576-y.*
[40] N. Spillane and D. J. Rixen, 用于稳健 *FETI* 和 *BDD*算法的自动谱粗空间, *Int. J. Numer. Meth. Engng., 95 (2013), pp. 953–990.*[41] G. Starke, 非对称椭圆问题的多层最小残差方法, *Numer. Linear Algebra Appl., 3 (1996), pp. 351–367.*[42] G. Starke, 非对称椭圆问题预条件迭代方法的数值域分析 , *Numer. Math., 78 (1997), pp. 103–117, https://doi.org/ 10.1007/s002110050306.*[43] A. Toselli and O. Widlund, 区域分解方法——算法与理论。, *Springer*计算数学丛书第*34*卷，柏林：*Springer*，*2005.*
[44] P.-H. Tournier, P. Jolivet, and F. Nataf, *FFDDM*：*FreeFem*区域分解方法。*https://doc.freefem.org/documentation/ffddm/index.html, 2019.*[45] P. K. Vinsome, *Orthomin*：求解稀疏联立线性方程组的一种迭代方法, 载于 *SPE*油藏性能数值模拟研讨会，*OnePetro*，*1976.*[46] O. Widlund, 一类非对称线性方程组的 *Lanczos*方法, *SI AM J. Numer. Anal., 15 (1978), pp. 801–812, https://doi.org/10.1137/ 0715053.*
[47] J. Xu and X.-C. Cai, 用于非对称或不定问题的预条件广义最小残量法, *Math. Comput., 59 (1992), pp. 311–319, https://doi.org/10. 2307/2153059.*