Metoda GMRES (**G**eneralized **M**inimal **Res**idual)

Cel: wyznaczyć przybliżone rozwiązanie układu liniowego

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$$

Macierz współczynników układu jest nieosobliwa i rzadka, poza tym – dowolna.

Przestrzeń Kryłowa generowana przez wektor $\boldsymbol{v}$:

$$\mathcal{K}_m(\boldsymbol{v}) = \operatorname{span}\left\{\boldsymbol{v}, \boldsymbol{Av}, \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{v}, \ldots, \boldsymbol{A}^{m-1}\boldsymbol{v}\right\}, \ m = 1,2,\ldots$$

Idea metody GMRES:

W *m*-tej iteracji wyznaczamy wektor $\boldsymbol{x}_m$ taki, że $\boldsymbol{x}_m \in \mathcal{K}_m(\boldsymbol{b})$ i

$$\left\|\boldsymbol{r}_m\right\|_2 = \left\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}_m\right\|_2 = \min$$

Zbieżność zagwarantowana dzięki temu, że

$$\mathcal{K}_1(\boldsymbol{b}) \subset \mathcal{K}_2(\boldsymbol{b}) \subset \ldots \subset \mathcal{K}_m(\boldsymbol{b}) \subset \ldots \subset \mathcal{K}_n(\boldsymbol{b}) \equiv R^n$$

Realizacja:

W przestrzeni $\mathcal{K}_m$ tworzymy bazę ortonormalną $\{\boldsymbol{q_1}, \boldsymbol{q_2}, \ldots, \boldsymbol{q_m}\}$.

Zauważmy, że:

- $\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_k \in \mathcal{K}_{k+1}(\boldsymbol{b}) \quad , \quad \mathrm{k} = 1, 2, .., \mathrm{m}$
- $\mathcal{K}_1(\boldsymbol{b}) = \{\boldsymbol{w} \in R^n : \boldsymbol{w} = \alpha \boldsymbol{q}_1, \alpha \in R\}$, $\boldsymbol{q}_1 = \frac{1}{\beta}\boldsymbol{b}$, $\beta = \|\boldsymbol{b}\|_2$

Mają miejsce związki …

$$\begin{cases} \boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_1 = h_{11}\boldsymbol{q}_1 + h_{21}\boldsymbol{q}_2 \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_2 = h_{12}\boldsymbol{q}_1 + h_{22}\boldsymbol{q}_2 + h_{32}\boldsymbol{q}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_{m-1} = h_{1,m-1}\boldsymbol{q}_1 + h_{2,m-1}\boldsymbol{q}_2 + \ldots + h_{m-1,m-1}\boldsymbol{q}_{m-1} + h_{m,m-1}\boldsymbol{q}_m \\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_m = h_{1,m}\boldsymbol{q}_1 + h_{2,m}\boldsymbol{q}_2 + \ldots + h_{m-1,m}\boldsymbol{q}_{m-1} + h_{m,m}\boldsymbol{q}_m + h_{m+1,m}\boldsymbol{q}_{m+1} \end{cases}$$

W formie macierzowo wektorowej …

$$\boldsymbol{A}\left[\boldsymbol{q}_1 \,|\, \boldsymbol{q}_2 \,|\, \ldots \,|\, \boldsymbol{q}_m\right] = \left[\boldsymbol{q}_1 \,|\, \boldsymbol{q}_2 \,|\, \ldots \,|\, \boldsymbol{q}_m \,|\, \boldsymbol{q}_{m+1}\right] \underbrace{\begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \cdots & h_{1,m} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & \cdots & h_{2,m} \\ 0 & h_{3,2} & \cdots & h_{3,m} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & h_{m+1,m} \end{bmatrix}}_{\textit{macierz Hessenberga}}$$

Zwięźle …

$$\underset{n\times n}{\boldsymbol{A}}\ \underset{n\times m}{\boldsymbol{Q}_m} = \underset{n\times(m+1)}{\boldsymbol{Q}_{m+1}}\ \underset{(m+1)\times m}{\boldsymbol{H}_m}$$

Poszukujemy wektora $\boldsymbol{x}_m$ w postaci kombinacji wektorów bazowych …

$$\boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{Q}_m \boldsymbol{c}_m \quad \equiv \quad \boldsymbol{x}_m = \sum_{j=1}^{m} c_j \boldsymbol{q}_j$$

Obliczamy wektor reszty (residuum)…

$$\boldsymbol{r}_m = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}_m\boldsymbol{c}_m = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{Q}_{m+1}\boldsymbol{H}_m\boldsymbol{c}_m$$

Wykorzystamy następujące przedstawienie wektora prawych stron

$$\boldsymbol{b} = \beta\boldsymbol{q}_1 = \beta\boldsymbol{Q}_{m+1}\boldsymbol{e}_1 \quad , \quad \boldsymbol{e}_1 = [1,0,...,0]^T \in R^{m+1}$$

Po podstawieniu …

$$\boldsymbol{r}_m = \boldsymbol{Q}_{m+1}(\beta\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{H}_m\boldsymbol{c}_m) \;\Rightarrow\; \left\|\boldsymbol{r}_m\right\|_2 = \left\|\beta\boldsymbol{e}_1 - \boldsymbol{H}_m\boldsymbol{c}_m\right\|_2$$

Morał: minimalizacja normy euklidesowej residuum polega na rozwiązaniu z sensie najmniejszych kwadratów nadokreślonego układu liniowego

$$\boldsymbol{H}_m\boldsymbol{c}_m = \beta\boldsymbol{e}_1$$

Układ ten zawiera *m+1* równań z *m* niewiadomymi.

Pseudokod algorytmu GMRES (wersja ogólna, tj. wektor startowy jest dowolny)

START: wybierz $\boldsymbol{x}_0$, oblicz $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$, połóż $\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{r}_0 / \beta$, gdzie $\beta = \|\boldsymbol{r}_0\|_2$.

DLA $m = 1, 2, \ldots$:

$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_m$

DLA $j = 1, 2, \ldots, m$:

$h_{jm} = \boldsymbol{q}_j^T \boldsymbol{y}$

$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} - h_{jm}\boldsymbol{q}_j$

KONIEC j

$h_{m+1,m} = \|\boldsymbol{y}\|_2$; jeżeli $h_{m+1,m} = 0$ przejdź do obliczania $\boldsymbol{x}_m$ i zakończ!

$\boldsymbol{q}_{m+1} = \boldsymbol{y} / h_{m+1,m}$

Rozwiąż (w sensie najmniejszych kwadratów) układ $\boldsymbol{H}_m \boldsymbol{c}_m = \beta \boldsymbol{e}_1$

$\boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{Q}_m \boldsymbol{c}_m + \boldsymbol{x}_0$

Sprawdź kryterium zbieżności: jeśli spełnione – STOP.

KONIEC m

Komentarze:

1. Kolejne wektory bazy ortonormalnej wyznaczane są „w biegu”. W powyższym wariancie zastosowano **zmodyfikowany algorytm ortogonalizacji Grama-Schmidta**. W kontekście przestrzeni Kryłowa proces konstrukcji baz ortogonalnych nazywamy **algorytmem Arnoldiego**.
2. Proces ortogonalizacji może być oparty na wykorzystaniu metody odbić (Householdera).
3. W praktycznych implementacjach nadokreślony układ równań rozwiązywany jest „sprytnie” tj. przy wykorzystaniu szczególnej struktury macierzy współczynników (macierz Hessenberga).
4. W praktyce „obowiązkowe” jest stosowanie **preconditioningu**. Podobnie jak w PCGM, preconditioning polega na rozwiązaniu wewnątrz iteracji pomocniczego układu liniowego z macierzą „podobną widmowo” do macierzy $\boldsymbol{A}$.
5. W celu ograniczenia nadmiernego wzrostu liczby wektorów bazowych stosowany jest tzw. **restartowany GMRES**.

Szczegóły – np. w monografii Y. Saada pt. „Iterative methods for sparse linear systems”, 2-gie wyd., SIAM 2003.