Iteračné metódy riešenia lineárnych sústav na báze Krylovových podpriestorov

Ing. Gabriel Okša, CSc.

Matematický ústav
Slovenská akadémia vied
Bratislava

Stavebná fakulta STU

Obsah

Všeobecná projekčná metóda

- Úloha: nájsť riešenie sústavy lineárnych rovníc:

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{C}^{n\times n}, \quad x,\ b \in \mathbb{C}^{n\times 1}$$

- Všeobecná projekčná metóda hľadá aproximáciu $\tilde{x}$ z afinného podpriestoru $x_0 + \mathcal{K}$ s dimenziou m (x_0 je ľubovoľný počiatočný odhad), pričom má byť splnená Petrovova-Galerkinova podmienka

$$b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L},$$

kde $\mathcal{L}$ je ďalší tzv. testovací podpriestor s dimenziou m.
- Nech $\tilde{x} = x_0 + \delta,\ \delta \in \mathcal{K}$, a $r_0 \equiv b - Ax_0$ (počiatočné rezíduum). Potom Petrovova-Galerkinova podmienka má tvar:

$$(r_0 - A\delta, w) = 0 \quad \forall w \in \mathcal{L},$$

kde $r_{\mathrm{new}} \equiv r_0 - A\delta$ je nové rezíduum. Toto je základný projekčný krok.

Všeobecná projekčná metóda

- Maticová reprezentácia: Nech $V = [v_1, \ldots, v_m]$ je báza $\mathcal{K}$ a $W = [w_1, \ldots, w_m]$ je báza $\mathcal{L}$. Potom $\tilde{x} = x_0 + Vy$ a y je riešenie rovnice $W^T AVy = W^T r_0$.
- Nech A je SPD a $\mathcal{L} = \mathcal{K}$. Potom vektor $\tilde{x}$ je výsledkom ortogonálnej projekcie na $\mathcal{K}$ s počiatočným vektorom x_0 práve vtedy, ak
$$E(\tilde{x}) = \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}} E(x), \quad E(x) \equiv (A(x_\star - x), x_\star - x)^{1/2},$$
kde $x_\star$ je riešenie sústavy $Ax = b$.
- Nech A je regulárna a $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$. Potom vektor $\tilde{x}$ je výsledkom šikmej projekcie na $\mathcal{K}$ ortogonálne vzhľadom na $\mathcal{L}$ s počiatočným vektorom x_0 práve vtedy, ak
$$R(\tilde{x}) = \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}} R(x), \quad R(x) \equiv \|b - Ax\|.$$

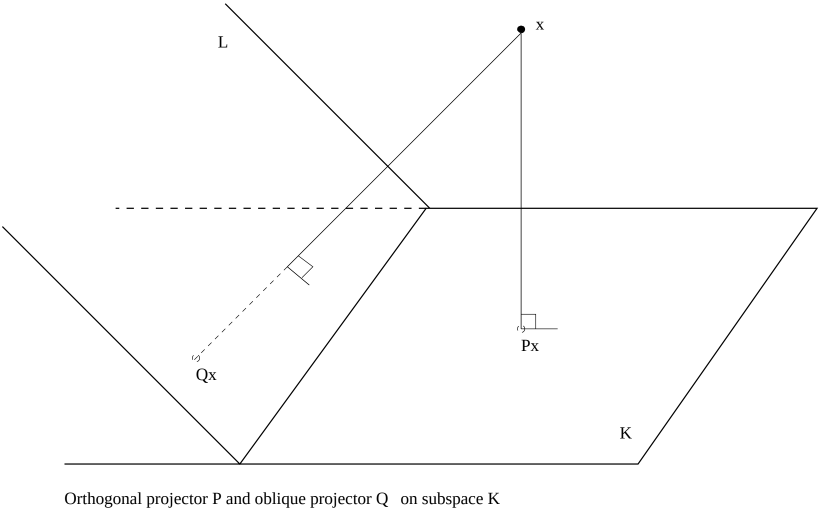

Figure: Ortogonálny (P) a šikmý (Q) projektor na podpriestor K s využitím podpriestoru L.

Krylovov podpriestor

- Krylovov podpriestor:
  $\mathcal{K}_m = \mathcal{K}_m(A, r_0) = \mathrm{span}\{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \ldots, A^{m-1} r_0\}$, kde
  $r_0 \equiv b - Ax_0$.
- Výber $\mathcal{L}_m$: $\mathcal{L}_m = \mathcal{K}_m(A, r_0)$, $\mathcal{L}_m = A\mathcal{K}_m(A, r_0)$, alebo
  $\mathcal{L}_m = \mathcal{K}_m(A^T, r_0)$.
- Jeden iteračný krok znamená nárast dimenzie $\mathcal{K}_m$ o jednotku.
- Pre všeobecné v je príslušný Krylovov podpriestor:
  $\mathcal{K}_m(A, v) = \mathrm{span}\{v, Av, A^2 v, \ldots, A^{m-1} v\}$.
- $\mathcal{K}_m$ je podpriestor vektorov x, ktoré sa dajú vyjadriť v tvare
  $x = q(A)v$, kde q je polynóm, $\deg(q) \leq m - 1$.

Arnoldiho metóda

Arnoldiho metóda je algoritmus na zostavenie ortonormálnej bázy Krylovovho podpriestoru $\mathcal{K}_m$; matica A je všeobecná a regulárna.

1. Vyber vektor v_1 s jednotkovou normou.
2. **for** $(j = 1;\ j <= m - 1;\ j + +)\ \{$
3. $\quad w_j = Av_j;$

//modifikovaná Gramm-Schmidtova ortogonalizácia

4. $\quad$ **for** $(i = 1;\ i <= j;\ i + +)\ \{$
5. $\qquad h_{ij} = w_j^T v_i;$
6. $\qquad w_j = w_j - h_{ij} v_i;$
7. $\quad \}$
8. $\quad h_{j+1,j} = \|w_j\|;$ **if** $(h_{j+1,j} == 0)$ **return**;
9. $\quad v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j};$
10. $\}$

Iné varianty ortogonalizácie: klasický GS, iterovaný CGS, IMGS, Householder

Arnoldiho metóda

- Maticová forma Arnoldiho algoritmu:
  Ak $V_m = [v_1, v_2, \ldots, v_m]$ a $\widetilde{H}_m = (h_{ij})$ je $(m+1) \times m$ horná Hessenbergova matica a H_m sa získa z $\widetilde{H}_m$ vynechaním jej posledného riadku, potom:
  $AV_m = V_{m+1}\widetilde{H}_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T; \quad V_m^T A V_m = H_m$.
- "Lucky breakdown": Ak v j-tom kroku Arnoldiho algoritmu $h_{j+1,j} = 0$, potom projekčná metóda na podpriestor $\mathcal{K}_j$ je presná - t.j. našlo sa presné riešenie rovnice $Ax = b$.

Generalized Minimum Residual Method (GMRES)

- GMRES je projekčná metóda s $\mathcal{K} = \mathcal{K}_m(r_0, A)$ a $\mathcal{L} = A\mathcal{K}_m(r_0, A)$, ktorá minimalizuje normu rezídua nad všetkými vektormi z afinného podpriestoru $x_0 + \mathcal{K}_m$ - t.j. minimalizuje funkcionál $R(y) = \|b - Ax\| = \|b - A(x_0 + V_m y)\|$.
- Ak $\beta = \|r_0\|$, potom:

$$b - Ax = r_0 - AV_m y = \beta v_1 - V_{m+1}\widetilde{H}_m y = V_{m+1}(\beta e_1 - \widetilde{H}_m y),$$

takže $R(y) = \|\beta e_1 - \widetilde{H}_m y\|$.

Algoritmus pre GMRES

1. Zvoľ m, x_0 a vypočítaj: $r_0 = b - Ax_0,\ \beta = \|r_0\|,\ v_1 = r_0/\beta$.
2. Definuj $(m+1) \times m$ maticu $\widetilde{H}_m = (h_{ij})$; polož $\widetilde{H}_m = 0$.
3. Vypočítaj V_m a $\widetilde{H}_m$ pomocou Arnoldiho metódy.
4. Vypočítaj y_m minimalizáciou $\|\beta e_1 - \widetilde{H}_m y\|$.
5. Vypočítaj aproximáciu riešenia: $x_m = x_0 + V_m y_m$.

Minimalizácia $\|\beta e_1 - \widetilde{H}_m y\|$ (krok č. 4):

I. Vypočítaj QR dekompozíciu: $\widetilde{H}_m = Q_{m+1}\begin{pmatrix} R_m \\ 0 \end{pmatrix}$, kde R_m je rádu m, Q_{m+1} je ortogonálna rádu $m+1$.

II. Vypočítaj: $\tilde{g}_m = Q_{m+1}^T(\beta e_1) = \begin{pmatrix} g_m \\ \gamma_{m+1} \end{pmatrix}$.

III. Vypočítaj: $y_m = R_m^{-1} g_m, \quad \|r_m\| = \|b - Ax_m\| = |\gamma_{m+1}|$.

Konvergenciu možno testovať podľa normy rezídua, t.j. podľa $|\gamma_{m+1}|$.

Symetrická Lanczosova metóda

Arnoldiho procedúra: $H_m = V_m^T A V_m$, H_m je horná Hessenbergova matica. Ak A je symetrická, potom H_m je tiež symetrická, a teda je trojdiagonálna.

1. Zvoľ m, x_0 a vypočítaj: $r_0 = b - Ax_0;\ \beta_1 = \|r_0\|;\ v_1 = r_0/\beta;$
2. **for** $(j = 1;\ j <= m;\ j++)$ $\{$
3. $\quad w_j = Av_j;$
4. $\quad$ **if** $(j\,! = 1)$ $w_j = w_j - \beta_j v_{j-1};$
5. $\quad \alpha_j = w_j^T v_j;$
6. $\quad w_j = w_j - \alpha_j v_j;$
7. $\quad \beta_{j+1} = \|w_j\|;$
8. $\quad$ **if** $(\beta_{j+1}\,! = 0)$ $v_{j+1} = w_j/\beta_{j+1};$
9. $\quad$ **if** $(\beta_{j+1} == 0)$ $j = m;$ $\quad \}$ //“lucky breakdown”
10. Polož: $T_m = \mathrm{tridiag}(\beta_i, \alpha_i, \beta_{i+1})$ a $V_m = [v_1, \ldots, v_m]$.
11. Vypočítaj: $y_m = T_m^{-1}(\beta_1 e_1)$ a $x_m = x_0 + V_m y_m$.
12. Rezíduum: $\|r_m\| = \beta_{m+1}|e_m^T y_m|$ (ako GMRES).

Direct Lanczos - priama forma - 1

- Priama forma: postupne sa počíta LU dekompozícia symetrickej, trojdiagonálnej matice T_m: $T_m = L_m U_m$, kde L_m je dolná bidiagonálna s jednotkami na diagonále a U_m je horná bidiagonálna matica. Pre $m = 4$:

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \\ & \beta_3 & \alpha_3 & \beta_4 \\ & & \beta_4 & \alpha_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \lambda_2 & 1 & & \\ & \lambda_3 & 1 & \\ & & \lambda_4 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \eta_1 & \beta_2 & & \\ & \eta_2 & \beta_3 & \\ & & \eta_3 & \beta_4 \\ & & & \eta_4 \end{pmatrix}$$

- Základné vzťahy:
  Prvok súčinu $(k, k-1)$, $k \geq 2$: $\quad \beta_k = \lambda_k \eta_{k-1}$.
  Prvok súčinu (k, k), $k \geq 1$: $\quad \alpha_k = \lambda_k \beta_k + \eta_k$.

D-Lanczos - priama forma - 2

- Približné riešenie:
  $x_m = x_0 + V_m y_m = x_0 + V_m T_m^{-1}(\beta e_1) = x_0 + V_m U_m^{-1} L_m^{-1}(\beta e_1)$.
- Položme $P_m = V_m U_m^{-1}$ a $z_m = L_m^{-1}(\beta e_1)$; potom:
  $x_m = x_0 + P_m z_m$.
- $P_m U_m = V_m \Rightarrow$ posledný stĺpec: $p_m = \eta_m^{-1}[v_m - \beta_m p_{m-1}]$.
- β_m je z Lanczosovho algoritmu a η_m je z m-tého kroku Gaussovej eliminácie trojdiagonálnej matice:
  $\lambda_m = \beta_m / \eta_{m-1}; \ \eta_m = \alpha_m - \lambda_m \beta_m$.
  (α_m je diagonálny prvok T_m pred redukciou).
- $L_m z_m = \beta e_1 \Rightarrow z_m = \begin{pmatrix} z_{m-1} \\ \zeta_m \end{pmatrix}, \ \zeta_m = -\lambda_m \zeta_{m-1}$.

  Takže: $x_m = x_0 + (P_{m-1}, p_m) \begin{pmatrix} z_{m-1} \\ \zeta_m \end{pmatrix} =$
  $x_0 + P_{m-1} z_{m-1} + \zeta_m p_m = x_{m-1} + \zeta_m p_m$.

D-Lanczos - priama forma - 3

Zvoľ x_0, tol.

$r_0 = b - Ax_0;\ \beta_1 = \|r_0\|;\ \zeta_1 = \beta_1;\ v_1 = r_0/\beta_1;$

$\lambda_1 = 0;\ p_0 = 0;\ v_0 = 0;\ m = 0;$

do $\{$

$\quad m = m + 1;$

$\quad w = Av_m - \beta_m v_{m-1};\ \alpha_m = w^T v_m;$

$\quad$ **if** $(m > 1)\ \{$

$\qquad \lambda_m = \beta_m/\eta_{m-1};$

$\qquad \zeta_m = -\lambda_m \zeta_{m-1};\}$

$\quad \eta_m = \alpha_m - \lambda_m \beta_m;$

$\quad p_m = \eta_m^{-1}(v_m - \beta_m p_{m-1});$

$\quad x_m = x_{m-1} + \zeta_m p_m;$

$\quad w = w - \alpha_m v_m;$

$\quad \beta_{m+1} = \|w\|;\ v_{m+1} = w/\beta_{m+1};$

$\}$ **while** $(\|b - Ax_m\| >= \mathrm{tol});$

Metóda konjugovaných gradientov (CG) - 1

- Matica A je symetrická, pozitívne definitná (SPD) a $\mathcal{K} = \mathcal{L} = \mathcal{K}_m(r_0, A)$.
- Pomocné vektory p_i, produkované D-Lanzcosovým algoritmom, sú A-ortogonálne, t.j. konjugované: $(Ap_i, p_j) = 0 \; \forall i \neq j$.

  Dôkaz:
  $P_m^T A P_m = U_m^{-T} V_m^T A V_m U_m^{-1} = U_m^{-T} T_m U_m^{-1} = U_m^{-T} L_m$,
  čo je dolná trojuholníková, symetrická matica $\Rightarrow$ je diagonálna.
- Pretože $r_m = -\beta_{m+1}(e_m^T y_m) v_{m+1}$, reziduálne vektory sú vzájomne ortogonálne: $(r_i, r_j) = 0 \; \forall i \neq j$.

CG - 2

- Hľadajme: $x_{m+1} = x_m + \omega_m p_m \Rightarrow r_{m+1} = r_m - \omega_m A p_m$.
- Ortogonalita rezíduí:
  $(r_{m+1}, r_m) = 0 \Rightarrow \omega_m = (r_m, r_m)/(Ap_m, r_m)$.
- Nový smer: $p_{m+1} = r_{m+1} + \phi_m p_m$,
  takže: $(Ap_m, r_m) = (Ap_m, p_m - \phi_{m-1} p_{m-1}) = (Ap_m, p_m)$,
  čiže: $\omega_m = (r_m, r_m)/(Ap_m, p_m)$.
- Konjugovanosť smerov:
  $0 = (Ap_m, p_{m+1}) = (Ap_m, r_{m+1}) + \phi_m (Ap_m, p_m) \Rightarrow$
  $\phi_m = -(Ap_m, r_{m+1})/(Ap_m, p_m)$.
- Konečná forma pre ϕ_m:
  $r_{m+1} = r_m - \omega_m A p_m \Rightarrow Ap_m = -\omega_m^{-1}(r_{m+1} - r_m) \Rightarrow$
  $\phi_m = (r_{m+1}, r_{m+1} - r_m)/[\omega_m (Ap_m, p_m)]$
  $= (r_{m+1}, r_{m+1})/(r_m, r_m)$.

CG - 3

1. Zvoľ x_0, tol.
2. $r_0 = b - Ax_0;\ p_0 = r_0;\ \beta = \|r_0\|;\ m = 0;$
3. **do** $\{$
4. $\quad m = m + 1;$
5. $\quad \omega_{m-1} = (r_{m-1}, r_{m-1})/(Ap_{m-1}, p_{m-1});$
6. $\quad x_m = x_{m-1} + \omega_{m-1} p_{m-1};$
7. $\quad r_m = r_{m-1} - \omega_{m-1} A p_{m-1};$ $\quad /*$ nový gradient $*/$
8. $\quad \phi_{m-1} = (r_m, r_m)/(r_{m-1}, r_{m-1});$
9. $\quad p_m = r_m + \phi_{m-1} p_{m-1};$ $\quad /*$ nový smerový vektor $*/$
10. $\}$ **while** $(\|r_m\|/\beta >= \mathrm{tol});$

CG - konvergencia

- Nech x_m je približné riešenie v m-tom kroku CG a nech $x_\star$ je presné riešenie. Potom chyba približného riešenia je definovaná ako:

$$e_m \equiv x_\star - x_m.$$

- Pre SPD maticu A definujme číslo podmienenosti $\kappa(A)$ a A-normu ľubovoľného vektora z:

$$\kappa(A) \equiv \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}, \quad \|z\|_A \equiv (Az, z)^{1/2}.$$

- Potom:

$$\|x_\star - x_m\|_A \leq 2 \left[\frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1} \right]^m \|x_\star - x_0\|_A$$

Pri $\kappa(A) \gg 1$ je konvergencia veľmi pomalá.

Tri druhy predpodmienenia

- Účel: zvýšiť rýchlosť konvergencie iteračnej metódy tak, že sa rieši náhradný LS, kde nová matica sústavy má nižšiu hodnotu κ ako originálna matica.
- Originálny lineárny systém: $Ax = b$.
- Ľavé predpodmienenie: M regulárna, $M^{-1}Ax = M^{-1}b$.
- Pravé predpodmienenie: M regulárna, $AM^{-1}u = b, \quad x = M^{-1}u$.
- Predpodmienenie štiepením: A a M sú SPD, $M = LL^T$ (Choleskyho rozklad). Potom nová sústava má tvar:

$$L^{-1}AL^{-T}u = L^{-1}b, \quad x = L^{-T}u.$$

Táto transformácia LS zachováva symetriu matice sústavy.

PCG - ľavé predpodmienenie (1)

- Nie sú nutné separátne faktory L^{-1} a L^{-T}, aby sa zachovala symetria. SPD matica M definuje tzv. M-skalárny súčin: $(x, y)_M \equiv (Mx, y) = (x, My)$.
- $(M^{-1}Ax, y)_M = (Ax, y) = (x, Ay) = (x, M(M^{-1}A)y) = (Mx, M^{-1}Ay) = (x, M^{-1}Ay)_M$,
  t.j. matica $M^{-1}A$ je samoadjungovaná vzhľadom na M-skalárny súčin.
- Algoritmus CG sa prepíše pre LS $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ s novým M-skalárnym súčinom pomocou novej premennej $z_j = M^{-1}r_j = M^{-1}(b - Ax_j)$:

5. $\omega_{m-1} = (z_{m-1}, z_{m-1})_M / (M^{-1}Ap_{m-1}, p_{m-1})_M$;
6. $x_m = x_{m-1} + \omega_{m-1} p_{m-1}$;
7. $r_m = r_{m-1} - \omega_{m-1} Ap_{m-1}$; $/*$ nový gradient $*/$

7A. $z_m = M^{-1} r_m$; $/*$ pomocná premenná $*/$

8. $\phi_{m-1} = (z_m, z_m)_M / (z_{m-1}, z_{m-1})_M$;
9. $p_m = z_m + \phi_{m-1} p_{m-1}$;

PCG - ľavé predpodmienenie (2)

- Ale: $(z_j, z_j)_M = (r_j, z_j)$ a $(M^{-1}Ap_j, p_j)_M = (Ap_j, p_j)$.
- Potom s počiatočnými hodnotami:
  $r_0 = b - Ax_0;\ z_0 = M^{-1}r_0;\ p_0 = z_0;$
  má vnútorný cyklus zľava predpodmieneného algoritmu CG tvar:

  5. $\omega_{m-1} = (r_{m-1}, z_{m-1})/(Ap_{m-1}, p_{m-1});$
  6. $x_m = x_{m-1} + \omega_{m-1}p_{m-1};$
  7. $r_m = r_{m-1} - \omega_{m-1}Ap_{m-1};$ /* nový gradient */

  7A. $z_m = M^{-1}r_m;$ /* pomocná premenná */

  8. $\phi_{m-1} = (r_m, z_m)/(r_{m-1}, z_{m-1});$
  9. $p_m = z_m + \phi_{m-1}p_{m-1};$
- Krok 7A: ak $M = LL^T$, potom z_m získame v dvoch krokoch:
  $Mz_m = r_m \Leftrightarrow L(L^T z_m) = r_m \Leftrightarrow Lu_m = r_m,\ L^T z_m = u_m$.
  To isté platí aj pre z_0: $Lu_0 = r_0,\ L^T z_0 = u_0$.

Neúplná Choleskyho faktorizácia

- A je SPD $\Rightarrow$ Choleskyho faktorizácia: $A = LDL^T$, L je dolná trojuhol. s jednotkami na diagonále a D je diagonálna.
- Problém: L je spravidla oveľa menej riedka ako A. Preto sa počíta neúplná Choleskyho faktorizácia v tvare: $A = \hat{L}\hat{D}\hat{L}^T + W, \; W \neq 0$ (W sa nepočíta).

1. $\hat{d}_{11} = a_{11};$
2. **for** $(i = 2; \; i <= n; \; j++) \; \{$
3. **for** $(j = 1; \; j <= i - 1; \; j++) \; \{$
4. **if** $(a_{ij} == 0) \; \hat{\ell}_{ij} = 0;$
5. **else** $\hat{\ell}_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \hat{\ell}_{ik} \, \hat{d}_{kk} \, \hat{\ell}_{jk} \right) / \hat{d}_{jj}; \quad \}$
6. $\hat{l}_{ii} = 1; \; \hat{d}_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \hat{\ell}_{ik}^2 \, \hat{d}_{kk}; \quad \}$

Potom $M = \hat{L}\hat{D}\hat{L}^T$ a krok 7A (pozri predošlú stranu) sa rieši na tri etapy: $\hat{L}u_m = r_m; \; \hat{D}w_m = u_m; \; \hat{L}^T z_m = w_m$.

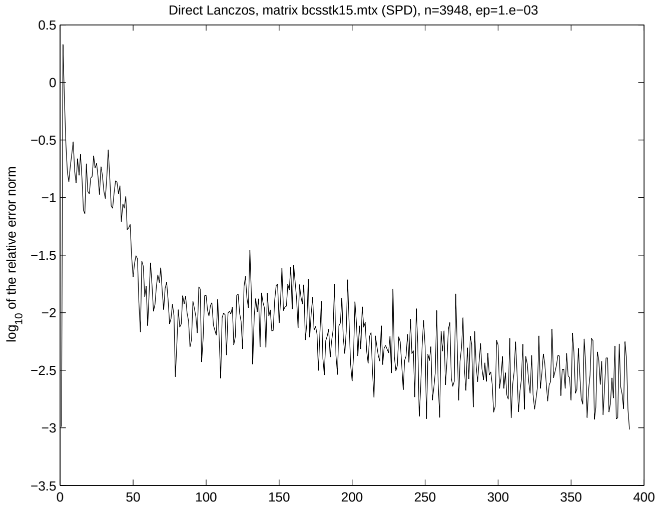

Figure: Priamy Lanczos, $\kappa(A) = 8 * 10^9,\ \mathrm{nnz}(A) = 60882$, relatívna norma chyby. Na konvergenciu bolo potrebných 395 iterácií, ale kvalita riešenia je slabá.

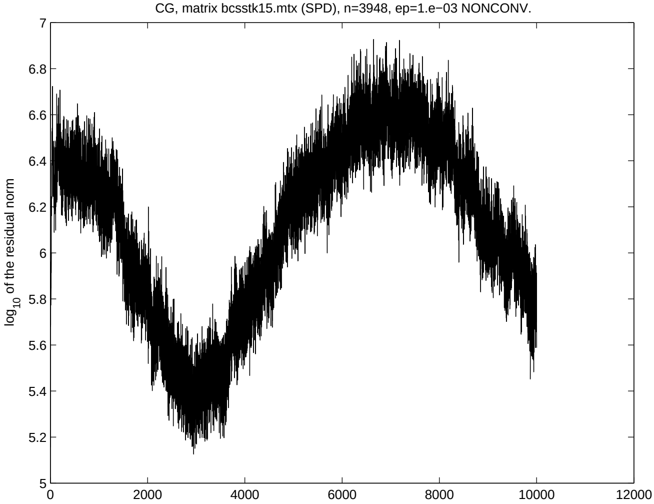

Figure: CG, $\kappa(A) = 8 * 10^9, \ \mathrm{nnz}(A) = 60882$, norma rezídua. Ten istý trend má rezíduum pre priameho Lanczosa.

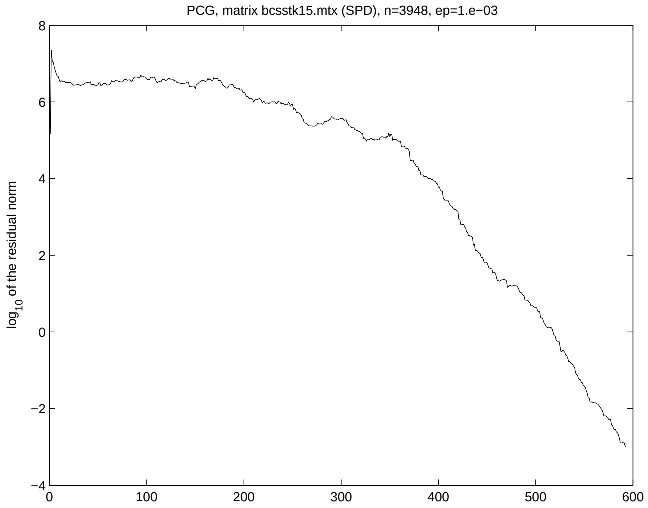

Figure: PCG, $\kappa(A) = 8 * 10^9,\ \mathrm{nnz}(A) = 60882$, norma rezídua. Na konvergenciu bolo potrebných 593 iterácií.