Arnoldiho algoritmus a metoda GMRES

- Arnoldiho algoritmus se používá pro „ortogonalizaci" báze v Krylovově prostoru a zobecněná metoda nejmenšího zbytkového rezidua (GMRES) pak hledá „optimální" řešení $Ax=b$ na tomto podprostoru
- tedy podobně jako u metody CG hledáme v k-té iteraci nejlepší aproximaci řešení $Ax=b$ na prostoru
  $$x_0 + K_k = x_0 + \mathcal{L}(r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0) \quad , r_0 = b - Ax_0$$
  a sice pomocí metody nejmenších čtverců
- ovšem Arnoldiho algoritmus nekonstruuje K_k aplikací A na r_0, protože $A^j r_0$ jsou pro rostoucí j stále více lineárně závislé (konvergují k vlastnímu vektoru matice A pro největší vlastní číslo)
  - K_k se konstruuje tak, že tvoříme ortogonální bázi $q_1, q_2, \dots, q_k$, přičemž v k-tém kroku ortogonalizujeme na předchozí vektory $v_k = Aq_k$ (q_k je „skoro" $\perp$ na $A^{k-1}r_0$)

    (Pozn: Pokud v_k bude ležet v K_k, pak z něho nezkonstruujeme vektor ortogonální na K_k, ale v tomto případě leží řešení v $x_0 + K_k$!)
  - tento proces odpovídá postupnému převádění matice A na Hessenbergův tvar:

maticově: $$AQ_k = Q_{k+1}\tilde{H}_k$$

$$\begin{pmatrix} & & \\ & A & \\ & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_1 & \cdots & q_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_1 & \cdots & q_{k+1} \end{pmatrix}\overbrace{\begin{pmatrix} h_{11} & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & h_{22} & \vdots \\ & h_{32} & \ddots \\ 0 & & h_{kk} \\ & & h_{k+1,k} \end{pmatrix}}^{\text{matice } (k+1)\times k\,!}$$

rekurzivně (vztah pro q_{k+1})
$$Aq_k = h_{1k}q_1 + \dots + h_{kk}q_k + h_{k+1,k}q_{k+1}$$

algoritmus:

$q_1 = r_0 / \|r_0\|_2$

pro $k = 1, 2, 3, \dots$

 $v = Aq_k$

 pro $j = 1, \dots, k$

  $h_{jk} = q_j^T v$

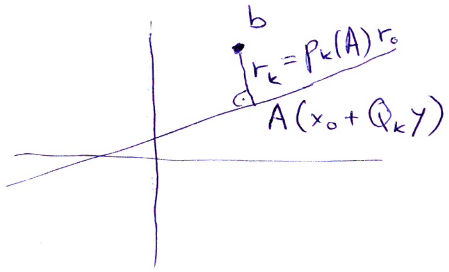
  $v = v - h_{jk} q_j$ ← zde provádíme modifikovanou Gram-Schmidtovu metodu

 $h_{k+1,k} = \|v\|_2$ ← zde by měla být kontrola, zda $v = 0$ a tedy i $h_{k+1,k} = 0$, pokud by měl Arnoldiho algoritmus pokračovat, nutno volit q_{k+1} ortogonální na $\mathcal{L}(q_1 \cdots q_k)$

 $q_{k+1} = v / h_{k+1,k}$

• jak najít řešení v prostoru $x_0 + K_k$?

- metoda nejmenšího rezidua



hledáme přibližné řešení

$$x_k = x_0 + Q_k y$$

báze v prostoru K_k

tak abychom minimalizovali reziduum $r_k = b - Ax_k$, tedy norma

$$\|r_k\|_2 = \|Ax_k - b\|_2 = \|Ax_0 + AQ_k y - b\|_2 = \|AQ_k y - r_0\|_2$$

musí být minimální. Protože z Arnoldiho algoritmu máme $AQ_k = Q_{k+1}\tilde{H}_k$, dostaneme

$q_1 \sim r_0$

$$\|r_k\|_2 = \|\underbrace{Q_{k+1}\tilde{H}_k y - r_0}_{\in K_{k+1}}\|_2 = \|\tilde{H}_k y - Q_{k+1}^T r_0\|_2 = \|\tilde{H}_k y - \|r_0\|_2 e_1\|_2$$

norma se nezmění vynásobením Q_{k+1}^T, protože vektor je z K_{k+1}

- potřebujeme tedy vyřešit metodou nejmenších čtverců soustavu

$$\tilde{H}_k y = \|r_0\|_2 e_1 \qquad (*)$$

matice $(k+1) \times k$

s výhodou použijeme QR rozklad $\tilde{H}_k$, protože je „skoro" horní △ matice, lze využít Givensovy rotace pro vynulování vždy jediného prvku pod diagonálou pro nejefektivnější implementaci

- algoritmus GMRES je tedy Arnoldiho alg. výše + vyřešení (*) v každém kroku k a spočtení $x_k = x_0 + Q_k y$

Lanczosův algoritmus a MINRES pro symetrické matice

• pokud máme symetrickou matici $A = A^T$, budou kromě h_{ij}, $i > j+1$ nulové i prvky $h_{ij} = q_j^T A^T q_i = h_{ji}$ pro $j > i+1$ a $\tilde{H}_k$ jsou tridiagonální matice

neboli $Aq_k = h_{k-1,k} q_{k-1} + h_{kk} q_k + h_{k+1,k} q_{k+1}$

• v tomto případě se kombinace s hledáním nejmenšího rezidua nazývá MINRES

algoritmus:

$\beta_0 = 0$, $q_0 = 0$, $q_1 = r_0 / \|r_0\|_2$

pro $k = 1, 2, 3 \ldots$

$v = Aq_k$

$\alpha_k = q_k^T v$

$v = v - \beta_{k-1} q_{k-1} - \alpha_k q_k$

$\beta_k = \|v\|_2$

$q_{k+1} = v / \beta_k$