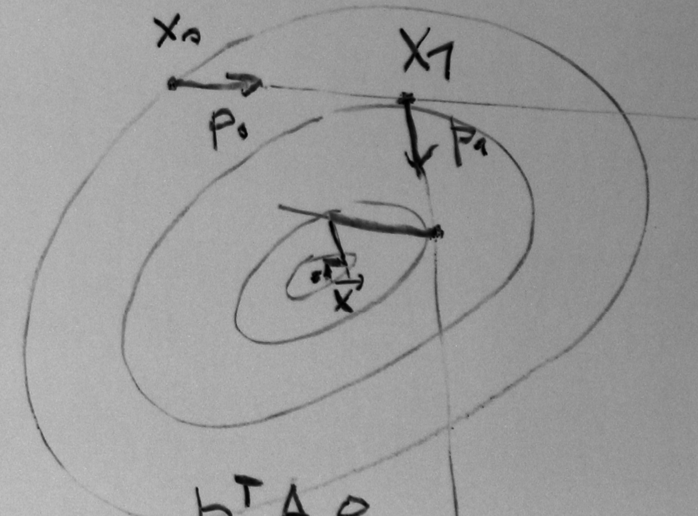
Gradientní iterační metody

princip: $Ax = b \iff$ minimum $\phi(x) \equiv \frac{1}{2} x^T A x - x^T b$

A sym. pozit. definit

$-\nabla\phi(x) = b - Ax \equiv r$ ... reziduum = směr nejrych. klesání

OBECNÁ METODA PŘÍMEK:



odhad x_0 a směr p_0

x_1 ... minimalizuje $\phi(\vec{x}_0 + \alpha_0 \vec{p}_0)$

nový směr p_1 .....

postoupnost $x_0, x_1, x_2, \ldots \longrightarrow x$

podm. na min. $\vec{p}_k \cdot \nabla\phi = 0 \longrightarrow \alpha_k = \dfrac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k} = -\dfrac{p_k^T A e_k}{p_k^T A p_k}$ ... $e_k \equiv x_k - x$

.. chyba řešení

Metoda sdružených gradientů CGM

(nebo prostě CG ... Conjugated gradients)

- volba ... $\vec{p}_k = -\nabla\phi(x_k) = \vec{r}_k$ ... METODA NEJMENŠÍHO SPÁDU

... směr nejrychl. klesání ϕ ... dá se Dk, že konverg.

ale pomalu ... problém ... směry se opakují

- náprava: ... Gram-Schmidtova ortogonalizace směrů $-\nabla\phi(x_0), -\nabla\phi(x_1), \ldots$

... po N iteracích (rozměr A .. $N \times N$) vyčerpá celý prostor

ale vůči A-součinu $(p_k, p_l)_A \equiv p_k^T A p_l = \delta_{kl}$

... motivace $\alpha_k = -\dfrac{p_k^T A e_k}{p_k^T A p_k}$ ... složka vektoru chyby $e_k \equiv x_k - x$

→ v ∀ iteraci "ukrojíme" z $e_0 \equiv x_0 - x$ jednu složku.

→ konvergence po N iteracích ! ... NEJPOZDĚJI ... V PŘESNÉ ARITMETICE

Algoritmus metody CG

OPTIMALIZACE

Složitost...

1x Ap na cyklus

$x_0 = 0$, $r_0 = b$, $p_0 = r_0$

$\rho_{m-1} = r_{m-1}^T r_{m-1}$

$w_{m-1} = A p_{m-1}$

$m = 1, 2, 3, \ldots$

$\alpha_{m-1} = \underline{r_{m-1}^T r_{m-1}} / p_{m-1}^T \underline{A p_{m-1}}$ minimum podle směru

$x_m = x_{m-1} + \alpha_{m-1} p_{m-1}$ nová iterace

$r_m = r_{m-1} - \alpha_m \underline{A p_{m-1}}$ nové residuum

$\rho_m = \ldots$

$\beta_m = \underline{r_m^T r_m} / \underline{r_{m-1}^T r_{m-1}}$

$p_m = r_m + \beta_m p_{m-1}$

nový směr (ortogonální na předch)

Krylov space: $\mathcal{K}_m = \mathcal{L}\{b, Ab, A^2 b, \ldots, A^{m-1} b\}$

obsahuje: $x_1 \ldots x_m$

$p_0 \ldots p_{m-1}$ ← báze v $\mathcal{K}_m$ OG vůči $(p_k | p_l)_A$

$r_0 \ldots r_{m-1}$

Vlastnosti CG-iterací:

(v přesné aritmetice)

- Ortogonalita: $p_k^T A p_\ell \equiv (p_k, p_\ell)_A = 0$ pro $k < \ell$ konjugovanost směrů

  $r_k^T r_\ell = 0 \quad k < \ell$ ... ortogonalita reziduí

  $r_k^T p_\ell = 0$

  $\Rightarrow$ konvergence nejpozději po N krocích (nebo pokud dělení 0 v algoritmu)

- konvergence (optimalita) v A-normě

  x_m minimalizuje chybu $\| \underbrace{x_m - x}_{e_m} \|_A$ v $\mathcal{K}_m$

  a tedy $\|e_1\|_A \geq \|e_2\|_A \geq \ldots\ldots$ $e_m \longrightarrow 0$ tj. $\|x_m - x\|_A = 0$ pro nějaké $m \leq N = \dim A$

- Souvislost s polynomiální aproximací spektra A

  $$\|e_m\|_A = \text{minimum } \forall \text{ polynomy } p_m \text{ st } m \; \|p_m(A) e_0\|_A$$

  ... CG hledá polynom st m, který má co nejmenší hodnoty na $\forall$ bodech spektra $\sigma(A)$

$\rightarrow$ pokud $\sigma(A)$ jen m růz. vl. č. $\longrightarrow$ CG konverguje po m iter.

Vlastnosti CG-iterací:

- rychlost konvergence: ... nechť A sym, posit. def.

+ číslo podmíněnost $\varkappa = \dfrac{\|A\|_2}{\|A^{-1}\|_2}$

pak:
$$\frac{\|x_n - x\|_A}{\|x_0 - x\|_A} \le \frac{2}{\left(\frac{\sqrt{\varkappa}+1}{\sqrt{\varkappa}-1}\right)^n + \left(\frac{\sqrt{\varkappa}+1}{\sqrt{\varkappa}-1}\right)^{-n}} \le 2\left(\frac{\sqrt{\varkappa}-1}{\sqrt{\varkappa}+1}\right)^n$$

DK: Trefethen, Bau Numerical lin. algebra

$$\frac{\sqrt{\varkappa}-1}{\sqrt{\varkappa}+1} \sim 1 - \frac{2}{\sqrt{\varkappa}}$$ ... konvergence po $O(\sqrt{\varkappa})$ iteracích

normí odhad většinou lepší!

OPERATION COUNT: — nejhůř $O(N^3)$

— prakticky ... méně než N iterací

... snadné využít řídkost A

... jen Ax_n potřeba

Předpodmínění (preconditioning)

– urychlování konvergence Krylovovských metod

… nahradit $Ax = b$ jinou úlohou se stejným řešením

nechť M regulární matice

$\iff$ $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ ….. iterujeme $\bar{A} \equiv M^{-1}A$

požadavky na M:

- rychlý výpočet M^{-1} (resp. řešení $My = c$)
- rychlejší konvergence ?

… typicky $M^{-1} \simeq A^{-1}$ tj. $\| M^{-1}A - I \|_2$ malé

Trefethen: – $M^{-1}A$ blízko normální matici

a spektrum $M^{-1}A$ je "clustered" $\lambda \in \mathbb{C}$

viz polynomiální aprox. výše →

Předpodmínění (preconditioning)

symetrický preconditioning:

$$M = CC^+ \longrightarrow M^{-1} = (C^{-1})^+ C^{-1}$$

$M^{-1}\times /$ $\quad Ax = b \quad \Longleftrightarrow \quad \underbrace{C^{-1}A(C^{-1})^+}_{\bar{A}} C^+ x = C^{-1} b$

$$\bar{A}\, y = \bar{b} \quad \ldots \quad x = C^{+-1} y$$

OBLÍBENÉ PŘEDPODMIŇOVAČE:

- M = diagonála A
- incomplete LU nebo Choleski R^+R
- hrubší grid nebo diskretizace nižšího řádu
- Periodická aprox. (nebo nějaká aprox. spec. vlastností)
- Část matice $A = A_1 + A_2$ (např. fyzikálně zanedb. členy)
- bloková struktura
- střídavé směry .....

Další Krylovovské metody

- **Lanczosovy iterace**: … opět A symetrická (Hermitovská) (ne nezbytně definitní)

→ konstrukce baze $\{\vec{q}_k\}$ v $\mathcal{K}_m$ tak, že A tridiagonální:

$$q_k^T q_l = \delta_{kl} \qquad q_k^T A q_l = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \\ & \beta_2 & \ddots & \\ & & & \alpha_m \end{pmatrix}$$

LANCZOSŮV ALGORITMUS:

$\beta_0 = 0$, $\vec{q}_0 = 0$, $\vec{b}$ libovol.

$\vec{q}_1 = b/\|b\|$

$m = 1, 2, 3 \ldots$: $\quad \vec{v} = A\vec{q}_m$

$$\alpha_m = q_m^T \vec{v}$$

$$\vec{v} = \vec{v} - \beta_{m-1}\vec{q}_{m-1} - \alpha_m \vec{q}_m$$

$$\beta_m = \|\vec{v}\| \; ; \; \vec{q}_{m+1} = \vec{v}/\beta_m$$

Další Krylovovské metody

- **Lanczosovy iterace:** … opět A symetrická (Hermitovská)

použití: diagonalizace matic … vl. č. $\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & \alpha_n \end{pmatrix}$ aproximují

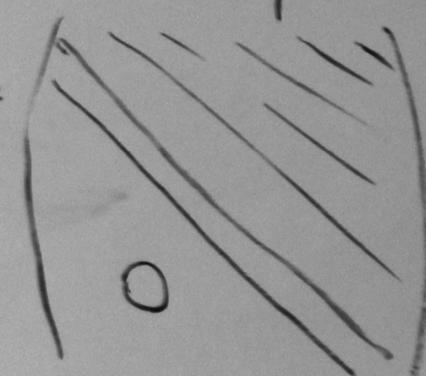
vl. č. A $\longrightarrow$ Hylleraas-Undheim … horní odhady $\boxed{\text{Ritz values}}$

… oddělující se vlastnost.

Další Krylovovské metody

Nesymetrické problémy $A^T \neq A$

- Lanczos $\longleftrightarrow$ Arnoldi ... ON báze v $\mathcal{K}_m$ ... q_m

  takže $q_i^T A q_j =$ 

  Horní Hessenberg $\longrightarrow$

  ... $\rightarrow$ rychlejší Gauss eliminace $Ax=b$

  $\rightarrow$ rychlejší vl. č. QR-metodou

- CG $\longleftrightarrow$ BiCG $\quad A\vec{p}$

  ... zavádí levé a pravé směry ... rekurence ... $\vec{q}A$ .... $A^T\vec{q}$

- GMRES ... iterace na $\mathcal{K}_m$ vycházející

  z minimalizace $\|r_m\|_2 \longrightarrow 0$