2.3 Lanczos

Če je A simetrična, za generiranje ON baze za $\mathcal{K}_k(A, r_0)$ uporabimo Lanczosevo metodo.

$v_1 = r_0/\|r_0\|$, $\beta_0 = 0$, $v_0 = 0$
$j = 1, 2, \ldots, k$
$\quad z = Av_j - \beta_{j-1}v_{j-1}$
$\quad \alpha_j = v_j^T z$
$\quad z = z - \alpha_j v_j$
$\quad \beta_j = \|z\|$
$\quad$ če je $\beta_j = 0$, prekini računanje
$\quad v_{j+1} = z/\beta_j$

Dobimo

$$AV_k = V_k T_k + \beta_k v_{k+1} e_k^T,$$

kjer je

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix}.$$

Za reševanje sistema $Ax = b$ uporabimo *Lanczosevo metodo za linearni sistem*.

$r_0 = b - Ax_0$

Lanczos$(A, r_0, k) \Longrightarrow AV_k = V_k T_k + \beta_k v_{k+1} e_k^T$

$y_k = T_k^{-1}\|r_0\|e_1$

$x_k = x_0 + V_k y_k$

Za ostanek velja $\|r_k\| = \beta_k |e_k^T y_k|$.

D-Lanczos

Podobno kot pri DIOM lahko preko LU razcepa matrike T_k pridemo do rekurzivnih formul za vektorje x_k in se tako izognemo temu, da bi morali na koncu za izračun $x_k = x_0 + V_k y_k$ poznati vse stolpce matrike V_k.

Ker je T_k tridiagonalna, ima LU razcep obliko $T_k = L_k U_k$, kjer je

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \lambda_2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_k & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_1 & \beta_1 & & \\ & \eta_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{k-1} \\ & & & \eta_k \end{bmatrix}.$$

Za rešitev x_k velja $x_k = x_0 + V_k T_k^{-1} \|r_0\| e_1 = x_0 + V_k U_k^{-1} L_k^{-1} \|r_0\| e_1$.

Če definiramo $P_k = V_k U_k^{-1}$ in $z_k = L_k^{-1} \|r_0\| e_1$, dobimo $x_k = x_0 + P_k z_k$.

Iz $P_k U_k = V_k$ sledi $\beta_{k-1} p_{k-1} + \eta_k p_k = v_k$ oziroma $p_k = \frac{1}{\eta_k} \left(v_k - \beta_{k-1} p_{k-1} \right)$.

Vektor z_k je oblike $z_k = \begin{bmatrix} z_{k-1} \\ \zeta_k \end{bmatrix}$, kjer je $\zeta_k = -\lambda_k \zeta_{k-1}$.

Ker je $x_{k-1} = x_0 + P_{k-1} z_{k-1}$ dobimo $x_k = x_{k-1} + \zeta_k p_k$.

D-Lanczos

$v_1 = r_0/\|r_0\|$, $\beta_0 = 0$, $v_0 = 0$
$j = 1, 2, \ldots, k$
$\quad z = Av_j - \beta_{j-1}v_{j-1}$
$\quad \alpha_j = v_j^T z$
$\quad z = z - \alpha_j v_j$
$\quad \beta_j = \|z\|$
$\quad \lambda_j = \beta_{j-1}/\eta_{j-1}$, (na začetku $\lambda_1 = 0$)
$\quad \eta_j = \alpha_j - \beta_{j-1}\lambda_j$, če je $\eta_j = 0$, končaj
$\quad \zeta_j = -\lambda_j \zeta_{j-1}$ *(na začetku $\zeta_1 = \|r_0\|$)*
$\quad p_j = (1/\eta_j)\,(v_j - \beta_{j-1}p_{j-1})$
$\quad x_j = x_{j-1} + \zeta_j p_j$.
$\quad$ če je $\beta_j = 0$, prekini računanje
$\quad v_{j+1} = z/\beta_j$

Za ostanek r_k, ki ga dobimo pri uporabi D-Lanczosa, velja

$$\|r_k\| = \beta_k |e_k^T y_k| = \beta_k \frac{|\zeta_k|}{|\eta_k|}.$$

Če LU razcep brez pivotiranja ne obstaja, se algoritem kritično zaustavi pri $\eta_j = 0$. Temu se izognemo z varianto, ki uporablja LU razcep z delnim pivotiranjem ali pa QR razcep.

Konjugirane smeri

Izrek 1. *Za vektorje, dobljene pri D-Lanczosu, velja:*

a) Vektorji $r_0, r_1, \ldots, r_k$ so paroma pravokotni.

b) Smeri p_i so A-konjugirane. Velja $\langle Ap_i, p_j \rangle = 0$ za $i \neq j$.

Dokaz: a) Iz zveze $r_k = -\beta_k e_k^T y_k v_{k+1}$ sledi da sta vektorja r_k in v_{k+1} kolinearna. Zato so vektorji $r_0, r_1, \ldots, r_k$ paroma pravokotni (saj to velja za vektorje $v_1, \ldots, v_{k+1}$).

b) $P_k = V_k U_k^{-1}$. Velja $P_k^T A P_k = U_k^{-T} V_k^T A V_k U_k^{-1} = U_k^{-1} T_k U_k^{-1} = U_k^{-T} L_k$.

Matrika $U_k^{-T} L_k$ je simetrična spodnje trikotna, torej diagonalna, in $p_j^T A p_i = 0$ za $i \neq j$.

Te zveze nam omogočajo, da za simetrične pozitivno definitne matrike pridemo do rekurzij brez eksplicitnega računanja matrik T_k in V_k. Pozitivna definitnost nam zagotavlja, da obstaja LU razcep brez pivotiranja.

Tako pridemo do *konjugiranih gradientov*.

Konjugirani gradienti

Iz D-Lanczosa lahko razberemo:

1) Vektorja r_{j-1} in v_j sta kolinearna.
2) Vektor p_j dobimo tako, da r_{j-1} prištejemo vektor v smeri p_{j-1}.
3) Vektor x_j dobimo tako, da x_{j-1} prištejemo vektor v smeri p_j.

Ker dolžina nove smeri p_j ni pomembna, velja

$$\begin{aligned} p_j &= r_{j-1} + \beta_{j-1} p_{j-1} \\ x_j &= x_{j-1} + \alpha_j p_j \\ r_j &= r_{j-1} - \alpha_j A p_j \end{aligned}$$

za primerne skalarje α_j, β_j (niso enaki kot pri Lanczosu). Skalarje določimo tako, da velja

a) Vektorji $r_0, r_1, \ldots, r_k$ so paroma pravokotni.
b) Smeri p_i so A-konjugirane oziroma $\langle A p_i, p_j \rangle = 0$ za $i \neq j$.

Dobimo

$$\alpha_j = \frac{r_{j-1}^T r_{j-1}}{p_j^T A p_j}, \qquad \beta_{j-1} = \frac{r_{j-1}^T r_{j-1}}{r_{j-2}^T r_{j-2}}.$$

CG algoritem

$$
\begin{aligned}
& r_0 = b - Ax_0, \quad p_1 = r_0 \\
& j = 1, 2, \ldots, k \\
& \qquad \alpha_j = \frac{\|r_{j-1}\|^2}{p_j^T A p_j} \\
& \qquad x_j = x_{j-1} + \alpha_j p_j \\
& \qquad r_j = r_{j-1} - \alpha_j A p_j \\
& \qquad \beta_j = \frac{\|r_j\|^2}{\|r_{j-1}\|^2} \\
& \qquad p_{j+1} = r_j + \beta_j p_j
\end{aligned}
$$

Izrek 2. *Pri $z = x_j$ je dosežen minimum $\|x - z\|_A$ po $z \in x_0 + \mathcal{K}_j(A, r_0)$.*

Lema 1. *Če je A s.p.d., potem $f(x) := \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b$ doseže minimum pri $x = A^{-1}b$.*

Lema 2. *Naj bo A s.p.d. Potem je ekvivalentno*

1) *minimizirati $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b$,*
2) *minimizirati $\|b - Ax_k\|_{A^{-1}}$,*
3) *minimizirati $\|\widehat{x} - x_k\|_A$.*

Konvergenca CG

Če je $d_i = x - x_i$, potem iščemo tak polinom P_k stopnje k, da bo $\|d_k\|_A = \|P_k(A)d_0\|_A$ minimalno, pri čemer je P_k polinom stopnje k in velja $P_k(0) = 1$.

Velja namreč $x - x_k = x - x_0 - Q_{k-1}(A)r_0$ za nek polinom Q_{k-1} stopnje $k-1$. Ker je $r_0 = A(x - x_0)$, dobimo

$$d_k = x - x_k = (I - Aq_{k-1}(A))d_0 = P_k(A)d_0,$$

kjer je P_k polinom stopnje k, za katerega velja $P_k(0) = 1$.

Izrek 3. *Če metoda CG ne skonvergira do k-tega koraka ($r_j \neq 0$ za $j < k$), potem velja $d_k = P_k(A)d_0$, kjer P_k minimizira $\|P_k(A)d_0\|_A$. Velja*

$$\frac{\|d_k\|_A}{\|d_0\|_A} = \min_{\substack{P_k \text{ stopnje } k \\ P_k(0)=1}} \frac{\|P_k(A)d_0\|_A}{\|d_0\|_A} \leq \min_{\substack{P_k \text{ stopnje } k \\ P_k(0)=1}} \max_{\lambda \in \sigma(A)} |P_k(\lambda)|.$$

Posledica 1. *Če ima s.p.d. matrika A le k različnih lastnih vrednosti, potem metoda CG skonvergira v največ k korakih.*

Polinomi Čebiševa

Polinomi Čebiševa so definirani z rekurzivno zvezo

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, \\ T_1(x) &= x, \\ T_{m+1}(x) &= 2xT_m(x) - T_{m-1}(x) \quad \text{za} \quad m > 1. \end{aligned}$$

Zanje velja:

a) $T_m(1) = 1$.

b) $T_m(x) = 2^{m-1}x^m + \mathcal{O}(x^{m-1})$.

c) $T_m(x) = \begin{cases} \cos(m \arccos x), & |x| \leq 1, \\ \cosh(m \operatorname{arccosh} x), & |x| \geq 1. \end{cases}$

č) $|T_m(x)| \leq 1$ za $|x| \leq 1$.

d) Izmed vseh polinomov stopnje m z vodilnim koeficientom 2^{m-1} ima T_m najmanjšo ∞-normo na $[-1, 1]$.

e) $T_m(x) = \dfrac{1}{2}\left[\left(x + \sqrt{x^2 - 1}\right)^m + \left(x + \sqrt{x^2 - 1}\right)^{-m}\right]$ za $|x| \geq 1$.

f) $T_m(1 + \epsilon) \geq 1 + m^2\epsilon$ za $\epsilon > 0$.

Ocena za konvergenco CG

Izrek 4. *Za približek* $x_j \in x_0 + \mathcal{K}_j(A, r_0)$*, dobljen z metodo CG, velja ocena*

$$\|x - x_j\|_A \leq \frac{1}{\left| T_j\left(\frac{\lambda_{\max}(A)+\lambda_{\min}(A)}{\lambda_{\max}(A)-\lambda_{\min}(A)}\right)\right|} \|x - x_0\|_A.$$

Posledica 2. *Za približek* $x_j \in x_0 + \mathcal{K}_j(A, r_0)$*, dobljen z metodo CG, velja ocena*

$$\|x - x_j\|_A \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa}-1}{\sqrt{\kappa}+1}\right)^j \|x - x_0\|_A,$$

kjer je

$$\kappa = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$$

spektralna občutljivost matrike A*.*

Študij konvergence CG

$$
\begin{aligned}
& r_0 = b - Ax_0, \quad p_1 = r_0 \\
& j = 1, 2, \ldots, k \\
& \qquad \alpha_j = \frac{\|r_{j-1}\|^2}{p_j^T A p_j} \\
& \qquad x_j = x_{j-1} + \alpha_j p_j \\
& \qquad r_j = r_{j-1} - \alpha_j A p_j \\
& \qquad \beta_j = \frac{\|r_j\|^2}{\|r_{j-1}\|^2} \\
& \qquad p_{j+1} = r_j + \beta_j p_j
\end{aligned}
$$

Izkaže se, da je dovolj obravnavati le diagonalne matrike A.

Namreč, če je Q ortogonalna matrika in $\widetilde{A} = Q^T A Q$, $\widetilde{x} = Q^T x$, $\widetilde{b} = Q^T b$ in vzamemo $\widetilde{x}_0 = Q^T x_0$, potem CG na sistemu $Ax = b$ z začetnim približkom x_0 vrne iste konstante α_j in β_j kot CG na sistemu $\widetilde{A}\widetilde{x} = \widetilde{b}$ z začetnim približkom $\widetilde{x}_0$. Za ustrezna ostanka velja $\|\widetilde{r}_j\| = \|r_j\|$.