3. Metode, ki temeljijo na minimalnem ostanku

Denimo, da smo z Arnoldijevim algoritmom zgenerirali ON bazo podprostora Krilova $\mathcal{K}_k(A, r_0)$ in velja $AV_k = V_k H_k + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T = V_k H_{k+1,k}$.

Iščemo $x_k \in x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0)$, da bo norma ostanka $\|b - Ax_k\|$ minimalna.

Nastavek je $x_k = x_0 + V_k y_k$. Velja

$$\|b-A(x_0+V_k y_k)\| = \|r_0 - AV_k y_k\| = \|r_0 - V_{k+1} H_{k+1,k} y_k\| = \| \|r_0\| e_1 - H_{k+1,k} y_k\|$$

in y_k je rešitev po metodi najmanjših kvadratov za predoločeni sistem $H_{k+1,k} y_k = \|r_0\| e_1$.

Metoda GMRES v grobem je:

1) izberi x_0, določi dimenzijo k za podprostor Krilova, izračunaj $r_0 = b - Ax_0$.
2) naredi k korakov Arnoldijevega algoritma z začetnim vektorjem $v_1 = r_0 / \|r_0\|$ da dobiš $H_{k+1,k}$ in V_{k+1}.
3) po metodi najmanjših kvadratov poišči y_k, ki minimizira $\| \|r_0\| e_1 - H_{k+1,k} y_k\|$.

Končni približek je potem $x_k = x_0 + V_k y_k$.

Če je A simetrična, je H_k tridiagonalna in dobimo metodo *MINRES*.

3.1 GMRES in praktična izvedba

Normo napake $r_k = b - Ax_k$ lahko izračunamo brez izračuna vektorja x_k.

Vemo, da je $\|r_k\| = \|\|r_0\|e_1 - H_{k+1,k}y_k\|$.

Zaradi zgornje Hessenbergove oblike matrike $H_{k+1,k}$ je predoločeni sistem z matriko $H_{k+1,k}$ najenostavneje reševati preko QR razcepa s pomočjo Givensovih rotacij.

Če so $R_{12}, \ldots, R_{k,k+1}$ take Givensove rotacije, da je $R_{k+1,k}^T \cdots R_{21}^T H_{k+1,k}$ zgornja trapezna matrika, potem je minimum $\|\|r_0\|e_1 - H_{k+1,k}y_k\|$ enak absolutni vrednosti $(k+1)$-vega elementa vektorja $\|r_0\| R_{k+1,k}^T \cdots R_{21}^T e_1$.

Če je Givensova rotacija $R_{j,j+1}$ določena s c_j in s_j, lahko hitro vidimo, da je napaka v k-tem koraku enaka $|s_1 \cdots s_k|\|r_0\|$.

Ko dimenzijo povečamo za ena, moramo dodati le še novo Givensovo rotacijo, saj se matriki $H_{k+1,k}$ in $H_{k+2,k+1}$ razlikujeta le v zadnjem stolpcu in vrstici.

Če rešujemo kompleksen sistem, uporabimo kompleksne Givensove rotacije oblike

$$\begin{bmatrix} \overline{c}_i & \overline{s}_i \\ -s_i & c_i \end{bmatrix},$$

kjer je $|c_i|^2 + |s_i|^2 = 1$.

Izvedba GMRES

Za z Arnoldijevim algoritmom zgenerirano ON bazo podprostora Krilova $\mathcal{K}_k(A, r_0)$ velja $AV_k = V_k H_k + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T = V_k H_{k+1,k}$.

S pomočjo Givensovih transformacij izračunamo razcep $H_{k+1,k} = Q_{k+1,k} R_k$, kjer ima $Q_{k+1,k}$ ortonormirane stolpce, R_k pa je zgornja trikotna.

Matrika R_k je lahko singularna le v primeru, ko je dimenzija $\mathcal{K}_k(A, r_0) < k$.

Rešitev je potem $x_k = x_0 + V_k R_k^{-1} Q_{k+1,k}^T \|r_0\| e_1$.

Za ostanek velja

$$r_k = V_{k+1}(\|r_0\| e_1 - H_{k+1,k} y_k) = V_{k+1} Q_{k+1,k} \gamma_{k+1} e_{k+1},$$

torej

$$\|r_k\| = |\gamma_{k+1}|,$$

kjer je γ_{k+1} zadnji element vektorja $Q_{k+1,k}^T e_1$.

Primerjava FOM in GMRES

Pri obeh metodah najprej z Arnoldijevim algoritmom zgeneriramo ON bazo podprostora Krilova $\mathcal{K}_k(A, r_0)$ in velja $AV_k = V_k H_k + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T = V_k H_{k+1,k}$.

Pri FOM vzamemo $x_k^F = x_0 + V_k y_k^F$, kjer je $H_k y_k^F = \|r_0\| e_1$.

Pri GMRES vzamemo $x_k^G = x_0 + V_k y_k^G$, kjer y_k^G minimizira $\|H_{k+1,k} y_k^G - \|r_0\| e_1\|$.

Za ostanek pri FOM vemo, da je $\|r_k^F\| = h_{k+1,k} |e_k^T y_k^F|$.

Denimo, da smo z uporabo $k-1$ Givensovih rotacij spravili matriko H_k v zgornjo trikotno obliko: $R_k = R_{k-1,k}^T \cdots R_{12}^T H_k$. Če je Givensova rotacija $R_{j,j+1}$ določena s c_j in s_j, potem ima vektor $R_{k-1,k}^T \cdots R_{12}^T e_1$ zadnji element oblike $(-1)^{k-1} s_1 \cdots s_{k-1}$. Torej je

$$\|r_k^F\| = \frac{h_{k+1,k}}{|r_{kk}|} |s_1 \cdots s_{k-1}| \|r_0\|,$$

kjer je r_{kk} zadnji element matrike R_k.

Pri GMRES naredimo še eno Givensovo rotacijo in dobimo $\|r_k^G\| = |s_1 \cdots s_{k-1} s_k| \|r_0\|$.

$R_{k,k+1}$ je določena z r_{kk} in $h_{k+1,k}$, velja $c_k = \frac{r_{kk}}{\sqrt{r_{kk}^2 + h_{k+1,k}^2}}$ in $s_k = \frac{h_{k+1,k}}{\sqrt{r_{kk}^2 + h_{k+1,k}^2}}$.

Tako pridemo do prve ocene $\|r_k^F\| = \frac{1}{|c_k|} \|r_k^G\|$.

Primerjava FOM in GMRES

Naj bo $\rho_k^F = \|r_k^F\|$ in $\rho_k^G = \|r_k^G\|$.

Ugotovili smo $\rho_k^F = \frac{1}{|c_k|}\rho_k^G$.

Iz $\rho_k^G = |s_1 \cdots s_{k-1} s_k| \|r_0\|$ sledi $\rho_k^G = |s_k| \rho_{k-1}^G$.

Tako dobimo $|c_k| = \sqrt{1 - \left(\frac{\rho_k^G}{\rho_{k-1}^G}\right)^2}$ in $\rho_k^F = \dfrac{\rho_k^G}{\sqrt{1 - \left(\frac{\rho_k^G}{\rho_{k-1}^G}\right)^2}}$, od tod pa

$$\frac{1}{(\rho_k^F)^2} + \frac{1}{(\rho_{k-1}^G)^2} = \frac{1}{(\rho_k^G)^2}.$$

Tako pridemo do

$$\sum_{i=0}^{k} \frac{1}{(\rho_i^F)^2} = \frac{1}{(\rho_k^G)^2}.$$

Če je ρ_{k*}^F minimalen ostanek dosežen s FOM v prvih k korakih, je

$$\frac{1}{(\rho_k^G)^2} = \sum_{i=0}^{k} \frac{1}{(\rho_i^F)^2} \leq \frac{k+1}{(\rho_{k*}^F)^2}.$$

MINRES

Če je matrika A simetrična, potem je matrika $V_k^T A V_k$ tridiagonalna in za konstrukcijo lahko uporabimo Lanczosev algoritem. Podobno kot pri D-Lancsozu se lahko izognemo temu, da bi bilo potrebno shranjevati vektorje iz ON baze podprostora Krilova. Namesto tega lahko približke posodabljamo s kratkimi rekurzijami.

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

kjer je

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

Naj bo $T_{k+1,k} = Q_{k+1,k} R_k$ QR razcep, kjer ima $Q_{k+1,k}$ ortonormirane stolpcev, R_k pa je tridiagonalna zgornja trikotna matrika. Potem je

$$x_k = x_0 + V_k T_{k+1,k}^+ \|r_0\| e_1 = x_0 + V_k R_k^{-1} Q_{k+1,k}^T \|r_0\| e_1.$$

Če označimo $W_k = V_k R_k^{-1}$ in $z_k = Q_{k+1,k}^T \|r_0\| e_1$, potem je $x_k = x_0 + W_k z_k$.

Ko povečamo dimenzijo podprostora Krilova, moramo izračunati le zadnji stolpec W_{k+1} in zadnji element z_{k+1}. Tako dobimo rešitev $x_{k+1} = x_k + z_{k+1,k+1} w_{k+1}$.

Kratka rekurzija

Če je A simetrična, lahko pridemo do rezultata (bodisi FOM ali GMRES) le s tričlenskimi rekurzivnimi formulami.

Za splošno nesimetrično matriko pa tako FOM kot GMRES potrebujeta vse vektorje in rekurzija je v vsakem koraku daljša.

Za kakšne tipe matrik obstajajo algoritmi, ki s pomočjo kratkih rekurzij vrnejo optimalni približek iz podprostora Krilova? Kot optimalen rezultat pomeni, da dobimo x_k, ki v neki normi minimizira bodisi normo ostanka $b - Ax_k$ ali napake $x - x_k$.

Bistveno za kratko rekurzijo je, da je Hessenbergova matrika H_k, ki jo dobimo pri Arnoldijevem algoritmu, pasovna. Pravimo, da je $A \in CG(s)$, če je $h_{ij} = 0$ za $j - i \geq s$.

Izrek 1. [Faber, Manteuffel (1984)] *$A \in CG(s)$ natanko takrat, ko*

a) je minimalni polinom matrike A stopnje $\leq s$ ali
b) je A normalna in obstaja polinom q stopnje $\leq s - 1$, da je $q(A) = A^H$.

Pri $s = 2$ dobimo tričlenske rekurzivne formule. To je možno za matriko A, ki ima ali minimalni polinom stopnje ≤ 1, ali je hermitska, ali pa oblike $A = e^{i\phi}(\rho I + B)$, kjer je $B^H = -B$ in sta $\phi, \rho \in \mathbb{R}$.

Konvergenca GMRES

Iščemo tak polinom P_k stopnje k, da bo $\|r_k\| = \|P_k(A)r_0\|$ minimalno, pri čemer je P_k polinom stopnje k in velja $P_k(0) = 1$.

Velja namreč $b - Ax_k = b - Ax_0 - AQ_{k-1}(A)r_0$ za nek polinom Q_{k-1} stopnje $k-1$. Dobimo

$$r_k = (I - AQ_{k-1}(A))r_0 = P_k(A)r_0,$$

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

Izrek 2. *Če metoda GMRES ne skonvergira do k-tega koraka ($r_j \neq 0$ za $j < k$), potem velja $r_k = P_k(A)r_0$, kjer P_k minimizira $\|P_k(A)r_0\|$. Če se da matrika A diagonalizirati kot $A = XDX^{-1}$, potem velja*

$$\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|} = \min_{\substack{P_k \text{ stopnje } k \\ P_k(0)=1}} \frac{\|P_k(A)r_0\|}{\|r_0\|} \leq \|X\|\|X^{-1}\| \min_{\substack{P_k \text{ stopnje } k \\ P_k(0)=1}} \max_{\lambda\in\sigma(A)} |P_k(\lambda)|.$$

Ocena ni vedno uporabna. Tako npr. iz ocene ne sledi nujno $\|r_k\| \leq \|r_0\|$, kar je očitno iz same konstrukcije.

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

Konvergenca GMRES

Izkaže se, da konvergenca metode GMRES ni odvisna le od razporeditve lastnih vrednosti.

Izrek 3. [Greenbaum, Ptak, Strakoš (1996)] *Za poljubna nenaraščajoča pozitivna števila*

$$f_0 \geq f_1 \geq \cdots \geq f_{n-1}$$

in poljubna neničelna kompleksna števila $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ obstaja taka matrika A, da ima lastne vrednosti $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ in tak vektor b z normo $\|b\| = f_0$, da za ostanke pri metodi GMRES za reševanje sistema $Ax = b$ z $x_0 = 0$ velja $\|r_k\| = f_k$ za $k = 0, \ldots, n-1$.

Konvergenca ni odvisna le od lastnih vrednosti temveč tudi od lastnih vektorjev. Če je matrika lastnih vektorjev blizu ortogonalne, je pomemben samo razpored lastnih vrednosti.

V praksi se tudi tu pojavi superlinearna konvergenca. Če Ritzeve vrednosti matrike H_k dobro aproksimirajo lastno vrednost matrike A, potem lastna vrednost in pripadajoči lastni vektor ne vplivata več na konvergenco.

GMRES s ponovnim zagonom

Če dimenzija podprostora preveč naraste, potem po eni strani poorabimo veliko spomina za shranjevanje vektorjev matrike V_k, po drugi strani pa porabimo tudi veliko operacij za ortogonalizacijo novih vektorjev.

Zaradi tega lahko izvajamo GMRES le do dimenzije m, potem pa zadnji vektor vzamemo za nov začetni približek in postopek ponovimo. Tako dobimo metodo GMRES(m).

Težko je izbrati pravi m, saj se lahko pri premajhnem m zgodi, da metoda sploh ne konvergira. Zgodi se lahko tudi, da GMRES(m) stane skupno občutno več operacij kot pa GMRES($m+1$).

kvazi GMRES (QGMRES)

Pri GMRES za ostanek velja $b - Ax_k = V_{k+1}(\|r_0\|e_1 - H_{k+1,k}y_k)$, kjer y_k določimo tako, da minimizira $\|\|r_0\|e_1 - H_{k+1,k}y_k\|$.

Podobno kot pri IOM (in DIOM) lahko tudi pri GMRES pri računanju baze za $\mathcal{K}_k(A, r_0)$ novi vektor ortogonaliziramo le na nekaj zadnjih vektorjev. Tako ne dobimo ortonormirane baze, matrika $\widetilde{H}_{k+1,k}$ pa bo pasovna.

Pri metodi QGMRES pri računanju približka x_k vzamemo y_k, ki minimizira normo $\|\|r_0\|e_1 - \widetilde{H}_{k+1,k}y_k\|$. Tej normi pravimo kvazi-residualna norma vektorja $x_0 + V_k y_k$. V primeru, ko so stolpci matrike V_k ortonormirani, se metodi GMRES in QGMRES ujemata.

Tako kot pri FOM tudi tu lahko vektorje rekurzivno popravljamo in ne potrebujemo celotnih baznih vektorjev. Tako pridemo do metodo DQGMRES.