

Bi-Lanczos

izberi vektorja v_1, w_1 , da je $v_1^T w_1 = 1$

$$\beta_0 = \delta_0 = 0, v_0 = w_0 = 0$$

$$j = 1, 2, \dots, k$$

$$\alpha_j = (Av_j, w_j)$$

$$\tilde{v}_{j+1} = Av_j - \alpha_j v_j - \beta_{j-1} v_{j-1}$$

$$\tilde{w}_{j+1} = A^T w_j - \alpha_j w_j - \delta_{j-1} w_{j-1}$$

$$\delta_j = |(\tilde{v}_{j+1}, \tilde{w}_{j+1})|^{1/2}$$

če je $\delta_j = 0$, prekini računanje

$$\beta_j = (\tilde{v}_{j+1}, \tilde{w}_{j+1}) / \delta_j$$

$$v_{j+1} = \tilde{v}_{j+1} / \delta_j$$

$$w_{j+1} = \tilde{w}_{j+1} / \beta_j$$

Metoda se zalomi, če je $\delta_j = 0$. Do tega lahko pride zaradi:

- $\tilde{v}_{j+1} = 0$: Če rešujemo sistem $Ax = b$ in je $v_1 = r_0 = b - Ax_0$ je to **srečni zalom**.
- $\tilde{w}_{j+1} = 0$: Če rešujemo sistem z matriko A^T je to srečni zalom, sicer pa ne pomaga.
- $\tilde{v}_{j+1} \neq 0, \tilde{w}_{j+1} \neq 0$, toda $\tilde{v}_{j+1}^T \tilde{w}_{j+1} = 0$: To je **resni zalom**.

4.5 Ozadje resnega zaloma pri Bi-Lanczosu

Pristop temelji na posplošitvi teorije ortogonalnih polinomov. Vemo, da za vsak j obstaja polinom p_j stopnje j , da je $v_{j+1} = p_j(A)v_1$ in $w_{j+1} = p_j(A^T)w_1$. Sedaj za poljubna polinoma p, q definiramo bilinearno formo

$$\langle p, q \rangle = (p(A)v_1, q(A^T)w_1).$$

To je nedefinitni skalarni produkt in iščemo zaporedje *formalno ortogonalnih polinomov* (FOP) glede na ta produkt.

Polinom ψ_j stopnje j je *FOP*, če je $\langle \psi_j, \phi \rangle = 0$ za vsak polinom ϕ stopnje $\leq j - 1$.

Pravimo, da je FOP *regularen*, če je iz zgornjega pogoja določen do množenja s skalarjem enolično, sicer je *singularen*.

Za razliko od definitnega skalarnega produkta sedaj ne obstaja nujno regularen FOP za vsako stopnjo j .

Lema 1. Če je ψ_j regularen FOP, potem regularni FOP ψ_{j+1} obstaja natanko takrat, ko je $\langle \psi_j, \psi_j \rangle \neq 0$.

Do resnega zaloma pride v primeru, ko za neko stopnjo $L < L_* := \min(L_1, L_2)$, kjer je $L_1 = \dim(\mathcal{K}_N(A, v_1))$ in $L_2 = \dim(\mathcal{K}_N(A^T, w_1))$, ne obstaja regularen FOP.

Look-Ahead Lanczos

Vedno obstajajo indeksi $1 = n_1 < n_2 < \dots < n_J \leq L_*$, za katere obstaja regularen FOP stopnje $n_j - 1$.

Če je $n_J < L_*$, potem pride do *neresljivega zaloma*.

V nasprotnem primeru lahko uporabimo metodo Look-Ahead Lanczos. Obstaja mnogo variant, ideja pa je naslednja.

Preko tričlenskih rekurzivnih formul, ki jim zadoščajo $\psi_{n_{j-1}-1}$, ψ_{n_j-1} in $\psi_{n_{j+1}-1}$, izračunamo regularne FOP in dobimo regularne vektorje

$$v_{n_1}, \dots, v_{n_J} \quad \text{in} \quad w_{n_1}, \dots, w_{n_J}.$$

Te vektorje dopolnimo z vmesnimi vektorji do polnih baz za podprostor Krilova $\mathcal{K}(A, v_1)$ in $\mathcal{K}(A^T, w_1)$. Vmesne vektorje lahko izberemo tako, da so bločno biortogonalni, kar pomeni, da so vsi vektorji v_i v enem bloku (regularen vektor + vmesni vektorji) ortogonalni na vse vektorje w_j iz drugih blokov.

Tako namesto tridiagonalne na koncu postopka dobimo bločno tridiagonalno matriko T_k .

Bi-CGSTAB [van der Vorst (1992)]

Konvergenca pri metodi CGS je lahko dokaj nepravilna. Zaradi tega lahko pride do velikih zaokrožitvenih napak, še posebno zaradi samega vpliva kvadriranja na ostanek.

Za razliko od CGS pri metodi *stabiliziranih bikonjugiranih gradientov* metodo BiCG posplošimo tako, da bo konvergenca bolj gladka, še vedno pa računanje z matriko A^T ne bo potrebno.

Pri metodi CGS se računanju z matriko A^T izognemo tako, da vpeljemo vektorje

$$r'_j = \phi_j^2(A)r_0.$$

Pri metodi Bi-CGSTAB pa dobimo ostanke oblike

$$r'_j = \psi_j(A)\phi(A)r_0,$$

kjer je polinom $\phi_j(A)$ določen z metodo BiCG, polinom $\psi_j(A)$ pa je polinom, ki poskrbi za gladko konvergenco oz. za stabilizacijo konvergence. Definiramo ga rekurzivno kot

$$\psi_j(t) = (1 - \omega_j t)\psi_{j-1}(t),$$

kjer v vsakem koraku določimo konstanto ω_j .

Bi-CGSTAB kot kombinirana metoda

Metoda Bi-CGSTAB spada med kombinirane metode.

Na začetku predavanj smo spoznali t.i. posodobitev Richardsonove iteracije, kjer vpeljemo skalarje ω_i in iteriramo

$$x_k = x_{k-1} + \omega_{k-1}r_{k-1}.$$

Tako dobimo

$$r_k = (I - \omega_{k-1}A)r_{k-1}$$

oziroma $r_k = \psi_k(A)r_0$.

Pri Bi-CGSTAB kombiniramo zgornjo iteracijo z metodo BiCG.

Ozadje Bi-CGSTAB

Pri metodi BiCG mora veljati

$$\langle \phi_i(A)r_0, \phi_j(A^T)r_0^* \rangle = 0$$

za $j < i$, saj to pomeni, da je ostanek $r_i = \phi_i(A)r_0$ pravokoten na $\mathcal{K}_i(A^T, r_0^*)$.

Ekvivalentno bi bilo zahtevati da je r_i pravokoten na vektorje $\psi_j(A^T)r_0^*$ za take polinome, da je ψ_j stopnje j za $j = 0, \dots, i - 1$.

To pa pomeni

$$\langle \phi_i(A)r_0, \psi_j(A^T)r_0^* \rangle = \langle \psi_j(A)\phi_i(A)r_0, r_0^* \rangle = 0.$$

Pri metodi CGS vzamemo kar $\psi_j = \phi_j$, pri Bi-CGSTAB pa vzamemo polinome oblike

$$\psi_j(t) = (1 - \omega_1 t) \cdots (1 - \omega_j t).$$

V vsakem koraku imamo na voljo še prosti parameter ω_j . Izberemo ga tako, da minimiziramo $\|r_j\|$.

Algoritem Bi-CGSTAB

Če definiramo $r_j = \psi_j(A)\phi_j(A)r_0$, $p_j = \psi_{j-1}(A)\pi_{j-1}(A)r_0$, $q_j = \phi_j(A)\pi_{j-1}(A)r_0$, lahko izpeljemo rekurzivne zveze

$$\begin{aligned}r_j &= (I - \omega_j A)(r_{j-1} - \alpha_j A p_j) \\ p_j &= r_{j-1} + \beta_{j-1}(I - \omega_{j-1} A)p_{j-1}.\end{aligned}$$

Ko ustrezno preračunamo še koeficiente α_j , β_j in ω_j , pridemo do metode Bi-CGSTAB.

$$r_0 = b - Ax_0, \quad u_1 = p_1 = r_0$$

izberi r_0^* , da je $r_0^T r_0^* \neq 0$

$$j = 1, 2, \dots, k$$

$$\alpha_j = \frac{(r_{j-1}, r_0^*)}{(A p_j, r_0^*)}$$

$$s_j = r_{j-1} - \alpha_j A p_j$$

$$\omega_j = \frac{(A s_j, s_j)}{(A s_j, A s_j)}$$

$$x_j = x_{j-1} + \alpha_j p_j + \omega_j s_j$$

$$r_j = s_j - \omega_j A s_j$$

$$\beta_j = \frac{(r_j, r_0^*)}{(r_{j-1}, r_0^*)} \cdot \frac{\alpha_j}{\omega_j}$$

$$p_{j+1} = r_j + \beta_j(p_j - \omega_j A p_j)$$

Kaj še obstaja

Obstaja še mnogo algoritmov, npr:

- *TFQMR* Transpose-free QMR. Ta metoda je posplošitev QMR z enakim pristopom, kot ga uporabimo pri CGS. Tako se znebimo računanja z A^T , obenem pa v vsakem koraku minimiziramo kvazi-residual.
- *Bi-CGSTAB(l)*. Mi smo v bistvu spoznali Bi-CGSTAB(1), za katerega se da pokazati, da je kombinacija GMRES(1) in BiCG. Problem z GMRES(1) je, da ima polinom ψ_j po konstrukciji za realno matriko same realne ničle, tak polinom pa ne more dobro uničiti lastnih vrednosti matrike A , ki so lahko tudi kompleksne.
Pri Bi-CGSTAB(l) polinom $\psi_j(A)$ zgeneriramo na drugačen način in dobimo kombinacijo GMRES(l) in BiCG.

SYMMLQ

Kot zadnjo možnost smo omenili, da lahko izberemo

$$x_k \in A^T \mathcal{K}_k(A^T, r_0),$$

ki minimizira $\|x - x_k\|_2$. Na tem temelji metoda SYMMLQ, kjer predpostavimo, da je matrika A simetrična.

Po Lanczosem algoritmu dobimo

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

kjer je T_k tridiagonalna matrika.

Sedaj iščemo približek oblike $x_k = x_0 + AV_k y_k$, ki minimizira $\|x - x_k\|$.

Rešiti moramo predoločeni sistem $AV_k y_k = x - x_0$.

Če je $T_{k+1,k} = Q_{k+1,k} R_k$ QR razcep matrike $T_{k+1,k}$, potem lahko pokažemo, da kot rešitev dobimo

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

To nam spet omogoča, da dobimo kratko rekurzijo, s katero posodobimo x_k .

Če je matrika A s.p.d., je metoda ekvivalentna CG.

Kratka ponovitev lastnosti algoritmov

Metoda	MV	skal. prod.	SAXPY	Pomnilnik
FOM	1	$k + 1$	$k + 1$	$(k + 4)n$
D-Lanczos	1	2	4	$5n$
CG	1	2	3	$4n$
GMRES	1	$k + 1$	$k + 1$	$(k + 5)n$
BiCG	1/1	2	5	$6n$
QMR	1/1	2	8	$10n$
CGS	2	2	6	$9n$
Bi-CGSTAB	2	4	6	$8n$

FOM in GMRES:

- Za nesimetrične matrike.
- GMRES vrne rešitev z najmanjšo normo ostanka, FOM pa rešitev z pravokotnim ostankom.
- Če GMRES naredi v enem koraku bistveno izboljšavo, potem FOM vrne približno enako dober rezultat. Sicer pa FOM lahko nekaj korakov stagnira, GMRES pa vedno pridobiva.
- Če tudi FOM rešujemo preko QR, se metodi ne moreta zalomiti.
- Prostorska in časovna zahtevnost koraka linearno narašča, zato uporabljamo ponovni zagon.

Kratka ponovitev lastnosti algoritmov

Metoda	MV	skal. prod.	SAXPY	Pomnilnik
FOM	1	$k + 1$	$k + 1$	$(k + 4)n$
D-Lanczos	1	2	4	$5n$
CG	1	2	3	$4n$
GMRES	1	$k + 1$	$k + 1$	$(k + 5)n$
BiCG	1/1	2	5	$6n$
QMR	1/1	2	8	$10n$
CGS	2	2	6	$9n$
Bi-CGSTAB	2	4	6	$8n$

D-Lanczos:

- Za simetrične matrike.
- Teoretično vrne isti rezultat kot FOM.
- Lahko se zalomi, če LU razcep matrike T_k brez pivotiranja ne obstaja.

CG:

- Za simetrične pozitivno definitne matrike.
- Teoretično vrne isti rezultat kot FOM.
- Superlinearna konvergenca, če so ekstremne lastne vrednosti lepo separirane.

Kratka ponovitev lastnosti algoritmov

Metoda	MV	skal. prod.	SAXPY	Pomnilnik
FOM	1	$k + 1$	$k + 1$	$(k + 4)n$
D-Lanczos	1	2	4	$5n$
CG	1	2	3	$4n$
GMRES	1	$k + 1$	$k + 1$	$(k + 5)n$
BiCG	1/1	2	5	$6n$
QMR	1/1	2	8	$10n$
CGS	2	2	6	$9n$
Bi-CGSTAB	2	4	6	$8n$

BiCG:

- Za nesimetrične matrike, potrebuje množenje z A in A^T .
- Zalomi se, če se zalomi Lanc. biortogonalizacija ali ne obstaja LU razcep matrike T_k .
- Če je A simetrična, se ujema z D-Lanczosem.

QMR:

- Za nesimetrične matrike, potrebuje množenje z A in A^T , minimizira kvazi-residual.
- Bolj gladka konvergenca kot BiCG.
- Če je A s.p.d., se ujema z CG.
- Zalomi se, če se zalomi Lanczoseva biortogonalizacija .

Kratka ponovitev lastnosti algoritmov

Metoda	MV	skal. prod.	SAXPY	Pomnilnik
FOM	1	$k + 1$	$k + 1$	$(k + 4)n$
D-Lanczos	1	2	4	$5n$
CG	1	2	3	$4n$
GMRES	1	$k + 1$	$k + 1$	$(k + 5)n$
BiCG	1/1	2	5	$6n$
QMR	1/1	2	8	$10n$
CGS	2	2	6	$9n$
Bi-CGSTAB	2	4	6	$8n$

CCS:

- Za nesimetrične matrike, potrebuje samo množenje z A .
- Običajno zelo nepravilna konvergenca.
- Zaradi kvadratov so lahko prisotne velike zaokrožitvene napake.

Bi-CGSTAB:

- Za nesimetrične matrike, potrebuje samo množenje z A .
- Običajno bolj gladka konvergenca kot CGS in manjše napake.

Katero metodo izbrati?

Točnega pravila ni. Za razliko od direktnih metod se pri iterativnih metodah ne da dobiti splošne robustne metode, ki bo dobra za vse primere.

Ustrezna metoda je odvisna od

- lastnosti matrike A ,
- zahtevnosti množenja z matriko A (in A^T , če je na voljo),
- pomnilnika, ki ga imamo na voljo,
- poznavanja spektra matrike A ,
- *možnosti dobrega predpogojevanja*.

Nachtigal, Reddy in Trefethen so leta 1992 pokazali, da za vsako izmed metod tipa CG, BiCG, GMRES, CGS, CGLS obstaja razred linearnih sistemov, za katero je izbrana metoda najboljša. To pomeni, da najboljša metoda ne obstaja.