3.2 Krylovovská metoda pro obecné, nesymetrické matice. GMRES

Richardsonova metoda určuje opět iteraci

$$u_{i+1} = u_0 + \mathrm{Lin}\{r_0, \ldots, r_i\} \in u_0 + \mathcal{K}_{i+1}(r_0, A)$$

$$r_{i+1} = b - Au_{i+1} = b - Au_i - \omega A r_i = r_i - \omega A r_i$$

$$r_{i+1} \in \mathrm{Lin}\{r_0, \ldots, A^i r_0\} = \mathcal{K}_{i+1}(r_0, A),$$

kde $\mathcal{K}_{i+1}(r_0, A)$ je Krylovův prostor. V případě obecné regulární matice chceme opět najít metodu Krylovovského typu, která bude navíc splňovat nějakou podmínku optimality

$$\|u_{i+1} - u^*\|_\star = \min\{\|w - u^*\|_\star : \ w \in u_0 + \mathcal{K}_{i+1}(r_0, A)\}.$$

Je otázkou jakou máme v podmínce optimality použít normu. Eukleidovská norma se nehodí, neboť nás nutí pracovat s neznámým přesným řešením $u^* = A^{-1}b$. Je-li A obecná regulární matice, není možné k použít normu $\|\cdot\|_A$. Řešením je použít normu $\|\cdot\|_{A^TA}$, neboť matice A^TA je symetrická a pro chybu $(i+1)$-ní iterace v této normě platí

$$\begin{aligned} \|e_{i+1}\|^2_{A^TA} = \|u_{i+1} - u^*\|^2_{A^TA} &= \langle A^TA(u_{i+1} - u^*), u_{i+1} - u^*\rangle = \\ &= \langle A(u_{i+1} - u^*), A(u_{i+1} - u^*)\rangle = \\ &= \|b - Au_{i+1}\|^2 = \|r_{i+1}\|^2. \end{aligned}$$

V případě SPD matic jsme minimalizovali chybu v A-normě, nyní budeme minimalizovat residuum v eukleidovské normě. Podmínka optimality je tedy podmínkou minimálního rezidua

$$\|u_{i+1} - u^*\|_{A^TA} = \|r_{i+1}\| = \min\{\|Aw - b\| : \ w \in u_0 + \mathcal{K}_{i+1}(r_0, A)\}. \qquad (21)$$

3.2.1 Arnoldiho algoritmus

Pro realizaci podmínky (21) využijeme postupnou konstrukci ortonormální báze Krylovova prostoru, známou jako Arnoldiho algoritmus. Jeho součástí je Grammův-Schmidtův ortonormalizační proces:

Jsou dány vektory $v_1, \ldots, v_n$, potom

- normujeme první vektor
$$w_1 = \frac{v_1}{\|v_1\|},$$
- j-tý vektor ortonormální ke všem předchozím určíme pomocí předpisu
$$w_j = \frac{v_j - \sum_{k=1}^{j-1}(v_j, w_k)\, w_k}{\left\|v_j - \sum_{k=1}^{j-1}(v_j, w_k)\, w_k\right\|}.$$

Robustnější variantou je modifikovaný Gramův-Schmidtův ortonormalizační proces, viz Algoritmus 6.

Algoritmus 6 Modifikovaný Gramův-Schmidtův algoritmus

```
v_1, ..., v_n ⟵
w_1 = v_1 / ||v_1||
for j = 2, ..., n
    for k = 1, ..., j-1
        v_j = v_j - ⟨v_j, w_k⟩ w_k
    end
    w_j = v_j / ||v_j||
end
```

Arnoldiho metoda postupného vytváření Krylovova prostoru:

$$\begin{aligned} v_1 &= \frac{r_0}{\|r_0\|} \\ v_2 &= Av_1 \longrightarrow v_2 = v_2 - \langle v_2, v_1\rangle v_1 \longrightarrow v_2 = \frac{v_2}{\|v_2\|} \\ v_3 &= Av_2, \text{ atd.} \end{aligned}$$

Postupně vytváříme ortonormální bázi $\{v_1, v_2, v_3\}$,

$$\mathrm{Lin}\{v_1, v_2, v_3\} = \mathrm{Lin}\{r_0, Ar_0, A^2r_0\}.$$

Algoritmus 7 Arnoldiho metoda vytváření ortonormální báze

```
r_0 % generující (počáteční) vektor
v_1 = r_0 / ||r_0||
for j = 1, ..., i do
  w = Av_j % rozšíření současného prostoru
  for k = 1, ..., j do % ortogonalizace
    h_kj = ⟨w, v_k⟩
    w = w - h_kj v_k
  end
  h_{j+1,j} = ||w||
  v_{j+1} = w / h_{j+1,j}
```

Věta 3.3. *Nechť $V_k = [v_1, \ldots, v_k]$ je matice o rozměrech $n \times k$ (matice A má rozměry $n \times n$) se sloupci tvořenými ortonormálními vektory vytvořenými Arnoldiho metodou (Algoritmus 7). Potom*

$$AV_k = [Av_1, \ldots, Av_k] = V_{k+1}H_{k+1,k},$$

kde

$$H_{k+1,k} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & h_{22} & & h_{2k} \\ 0 & h_{32} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & h_{kk} \\ 0 & & & h_{k+1,k} \end{bmatrix}$$

je matice v tzv. horním Hessenbergově tvaru.

Důkaz. Poslední řádek algoritmu Arnoldiho metody dává

$$w = h_{j+1,j} \cdot v_{j+1} = Av_j - \sum_{l=1}^{j} h_{lj} v_l,$$

tedy Av_j vyjádříme jako

$$Av_j = \sum_{l=1}^{j+1} h_{lj} v_l = \sum_{l=1}^{k+1} \mathcal{H}_{lj} v_l,$$

kde $\mathcal{H}_{lj} = h_{lj}$ (pro $l = 1, \ldots, j+1$), $\mathcal{H}_{lj} = 0$ (pro $l = j+2, \ldots, k+1$). Souřadnicově

$$(AV_k)_{ij} = (Av_j)_i \quad = \quad \sum_{l=1}^{k+1} H_{jl} \, (v_l)_i = \sum_{l=1}^{k+1} H_{jl} \, (V_{k+1})_{il} = (V_{k+1} H_{k+1,k})_{ij} \, .$$

□

Algoritmus 8 Metoda GMRES s řešením normální soustavy (GMRES-NE)

u_0	počáteční odhad
m	max. počet iterací
$H = \text{zeros}(m+1, m)$	definujeme a nulujeme matici H
$V = V(n, m)$	definujeme matici pro ukládání v_i
$r_0 = b - Au_0$, $\rho_0 = \|r_0\|$	
$v_1 = r_0/\rho_0$	lze uložit $V(:, 1) = v_1$
for $i = 1, 2, \ldots, m$ do	
vypočti $w = Av_i$	
for $k = 1, \ldots, i$ do	
$h_{ki} = (w, v_k)$	$h_{ki} = H(k, i)$ - generujeme i-tý sloupec
$w = w - h_{ki} v_k$	
end	
$h_{i+1,i} = \|w\|$	
$v_{i+1} = w/h_{i+1,i}$	lze uložit $V(:, i+1) = v_{1+1}$
vypočti y: $H_\star^T H_\star y = \rho_0 H_\star^T e_1$	$H_\star = H(1 : (i+1), 1 : i)$ submatice
urči $u_i = u_0 + V_\star y$	$V_\star = V(:, 1 : (i+1)) = [v_1, \ldots, v_{i+1}]$
end	

3.2.2 Realizace podmínky optimality

Vraťme se k podmínce optimality: hledáme novou iteraci ve tvaru $u_{i+1} = u_0 + V_{i+1} y$, přičemž

$$\begin{aligned} \|b - Au_{i+1}\| &= \|b - Au_0 - AV_{i+1} y\| = \|r_0 - AV_{i+1} y\| = \|r_0 - V_{i+2} H_{i+2,i+1} y\| \\ &= \|V_{i+2} \left(\|r_0\| \cdot e_1 - H_{i+2,i+1} y \right)\| = \|\|r_0\| \cdot e_1 - H_{i+2,i+1} y\| \end{aligned}$$

Výše jsme využili skutečnosti, že V_k jsou ortonormální s plnou hodností, tedy je $\|Vx\|^2 = \langle Vx, Vx \rangle = \langle x, V^T V x \rangle = \|x\|^2$, $e_1 = (1, 0, \ldots, 0)^T$.

Podmínka

$$\|\|r_0\| \cdot e_1 - H_{i+2,i+1} y\| \to \min$$

je pak podle Věty 3.1 ekvivalentní řešení soustavy

$$H_{i+2,i+1}^T H_{i+2,i+1} y = \|r_0\| \, H_{i+2,i+1}^T e_1. \tag{22}$$

Uvedené skutečnosti nás vedou k první variantě algoritmu GMRES (Algoritmus 8), kdy úloha minimalizace je řešena s využitím normálních rovnic.

3.2.3 Realizace podmínky optimality pomocí QR rozkladu

Vedle řešení normální soustavy je QR faktorizace dalším způsobem, jak najít minimum $\|c - Hy\|$. Nechť Q, $Q^{-1} = Q^T$, je ortogonální matice, R je horní trojúhelníková matice,

$$QH = R,$$

potom

$$\|c - Hy\| = \|Q \, (c - Hy)\| = \|Qc - Ry\|$$

a proto bude řešení rovnice

$$Ry = Qc$$

minimalizovat $\|c - Hy\|$. Protože R je horní trojúhelníková matice, je uvedená rovnice jednoduše řešitelná zpětnou substitucí.

Vzhledem k postupné konstrukci H je QR faktorizace je velmi dobře realizovatelná, např. využitím Givensovy transformace:

$$G_{ij} = G_{ij}(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & g_{ii} & & g_{ji} & & \\ & & & & & & \\ & & g_{ij} & & g_{jj} & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix} \qquad \begin{aligned} g_{ii} &= g_{jj} = \cos\theta = c \\ g_{ij} &= -g_{ji} = \sin\theta = s \end{aligned}$$

Platí:

- G_{ij} je ortogonální matice,
- násobení $M \to G_{ij} M$ mění pouze prvky v i-tém a j-tém řádku matice,
- násobení G_{ij} lze použít k nulování prvku na místě $M(j, k)$. K tomu volíme

$$c = \frac{m_{ik}}{\sqrt{m_{ik}^2 + m_{jk}^2}}, \quad s = \frac{m_{jk}}{\sqrt{m_{ik}^2 + m_{jk}^2}}$$

- součin Givensových rotací je opět ortogonální matice. Speciálně lze tímto způsobem konstruovat ortogonální transformaci Q, která převede Hessenbergovu matici na trojúhelníkovou. Navíc v GMRES Hessenbergovu matici v každé iteraci pouze doplňujeme novým sloupcem. Pro převedení na horní trojúhelníkovou matici pak stačí v každé iteraci aplikovat jednu další rotaci a nulovat tak jeden nenulový prvek v posledním řádku. Tak dostáváme metodu GMRES(G) - Givens. Podrobnosti např. [Saad 2003].

3.2.4 Poznámky k implementaci GMRES

Z algoritmu 8 vidíme, že každá iterace obsahuje násobení maticí A, řadu skalárních součinů a řešení normální soustavy. Poslední operaci lze zefektivnit použitím QR faktorizace Givensovými transformacemi. Náročnost zvyšuje nutnost uchovávání vektorů báze a nutnost ortogonalizace vůči všem předchozím vektorům báze. V tomto ohledu máme možnost

- zmenšit počet potřebných iterací vhodným předpodmíněním,
- provádět GMRES jen do určitého počtu iterací, potom začít budovat nový Krylovův prostor. Hovoříme o restartované GMRES metodě.

Spolu s konvergencí se ještě zmíníme o korektnosti a případném kolapsu Arnoldiho procesu.

3.3 Konvergence GMRES

Věta 3.4. *Nechť A je diagonalizovatelná, $A = K^{-1}DK$, $\kappa(K) = \left\|K^{-1}\right\| \|K\|$. Potom platí odhad*

$$\frac{\|r_i\|}{\|r_0\|} \leq \kappa(K) \min_{p\in\mathbb{P}_i} \max_{\lambda\in\sigma(A)} |p(\lambda)| . \tag{23}$$

Důkaz. Platí $u_i \in u_0 + \mathcal{K}_i(r_0, A)$ a

$$\|b - Au_i\| = \min\{\|b - Au_0 - Av\| : v \in \mathcal{K}_i(r_0, A)\} .$$

Tedy

$$\|r_i\| = \|p_i(A)r_0\| \leq \left\|K^{-1}p_i(D)Kr_0\right\| \leq \kappa(K) \min_{p\in\mathbb{P}_i} \|p_i(D)r_0\| .$$

Odtud dostáváme (23), $\mathbb{P}_i$ je množina polynomů stupně i normovaných podmínkou $p(0) = 1$ pro $p \in \mathbb{P}_i$. □

Pro diagonalizovatelné matice dostáváme podobný odhad jako u metody sdružených gradientů, ale spektrum $\sigma(A)$ již nemusí být reálné a kladné. Nedostaneme tak stejný typ odhadu s odmocninou čísla podmíněnosti jako u metody CG, viz např. [Saad 2003].

Nechť spektrum $\sigma(A)$ je podmnožinou elipsy $\mathcal{E}$ se středem c a ohnisky $c \pm d$ a poloosou a, $\mathcal{E}$ neobsahuje počátek. Potom

$$\rho = \lim_{k\to\infty} \left(\min_{p\in\mathbb{P}_i} \|p_i(D)r_0\| \right)^{1/k} \sim \frac{a + \sqrt{a^2 - d^2}}{c + \sqrt{c^2 - d^2}}.$$

Definice 3.1. Prostor V nazveme **invariantní prostor matice** A, jestliže

$$v \in V \Rightarrow Av \in V.$$

Vraťme se ještě k Arnoldiho procesu a otázce korektnosti GMRES algoritmu. Zatím jsme počítali, že $w = Av_j$ dává rozšíření stávajícího Krylovova prostoru. Pokud tomu tak není,

$$Av_j \in \mathrm{Lin}\left\{r_0, \dots A^{j-1}r_0\right\},$$

potom v Arnoldiho procesu ani v GMRES algoritmu nemůžeme pokračovat (break down). Znamená to taky, že $\mathcal{K}_j$ je invariantní prostor matice A. V tomto případě je ale také $\mathcal{K}_j$ je invariantní prostor matice A^{-1}. Protože $r_0 \in K_j$, bude také $e_0 \in K_j$, tedy u_j bude v tomto případě přesným řešením. Jde tedy o šťastné přerušení (lucky break down).

Stejnou úvahou dospějeme ke skutečnosti, že v případě přesné aritmetiky musíme po n krocích (n je dimenze soustavy) dostat přesné řešení. Tento fakt ovšem nemá praktický význam, jednak je aritmetika nepřesná, jednak chceme dostat vhodné přibližné řešení za mnohem méně kroků (iterací).

3.4 MINRES

Definujme čtvercovou matici H_k,

$$H_k := V_k^T A V_k = V_k^T V_{k+1} H_{k+1,k} =$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & \ddots & & \vdots \\ & & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & h_{22} & & h_{2k} \\ 0 & h_{32} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & h_{kk} \\ 0 & & & h_{k+1,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1k} \\ h_{21} & h_{22} & & h_{2k} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & h_{k,k-1} & h_{kk} \end{bmatrix}$$

Věta 3.5. *Pokud je A symetrická, je H_k také symetrická a tedy třídiagonální. To znamená, že $h_{ik} = 0$ pro $i < k - 1$. Není tedy třeba ortogonalizovat ke všem předchozím vektorům, stačí ke dvěma předchozím vektorům.*

V případě symetrické matice tedy lze GMRES výrazně zjednodušit, dostáváme tak metodu MINRES.

Symetrická matice je diagonalizovatelná, lze tedy použít konvergenční větu pro GMRES (Věta (3.4)). Navíc je $\kappa(K) = 1$ a spektrum reálné. Pro MINRES lze proto dokázat větu analogickou konvergenční větě pro CG, viz např. [Elman et al. 2005].

Věta 3.6. *Nechť A je symetrická, $\sigma(A) \subset (-a, -b) \cup (c, d)$, potom po $2i$ iteracích dostáváme odhad*

$$\|r_{2i}\| \leq 2 \left(\frac{\sqrt{ad} - \sqrt{bc}}{\sqrt{ad} + \sqrt{bc}} \right)^i \|r_0\| .$$