4.1 Předpodmíněná metoda sdružených gradientů

Pro předpodmínění použijeme SPD matici B.

$$\begin{aligned} B^{-1}Au &= B^{-1}b \\ \tilde{A}u &= \tilde{b} \end{aligned}$$

Při této transformaci ztrácíme symetrii ve standardním skalárním součinu. Pokud však použijeme skalární součin indukovaný B, $(u,\, v)_B = (Bu,\, v)$, potom bude

- $\tilde{A} = B^{-1}A$ symetrická vzhledem k $(\cdot,\, \cdot)_B$,
  $(\tilde{A}u,\, v)_B = (Au,\, v) = (u,\, Av) = (B^{-1}Bu,\, Av) = (Bu,\, B^{-1}Av) = (u,\, \tilde{A}v)_B$,

- $\tilde{A} = B^{-1}A$ pozitivně definitní vzhledem k $(\cdot,\, \cdot)_B$,
  $(\tilde{A}v,\, v)_B = (Av,\, v) \geq 0$, $0 = (\tilde{A}v,\, v)_B = (Av,\, v) \Rightarrow v = 0$.

Nyní můžeme použít standardní CG metodu pro transformovanou matici $\tilde{A}$ a pravou stranu $\tilde{b}$ a pro skalární součin $(\cdot,\, \cdot)_B$.

V každé iteraci tedy přibývá jedna maticová operace - nutnost řešit soustavu $B\tilde{r}_i = r_i$ pro výpočet pseudorezidua $\tilde{r}_i$. Počet skalárních součinů zůstává stejný jako bez předpodmínění, skalární součiny $(\cdot,\, \cdot)_B$ jsou převedeny na standardní $(\cdot,\, \cdot)$ díky práci s transformovanými i netransformovanými veličinami.

Při práci s SPD maticemi A i B se při analýze předpodmiňovačů často využívá tzv. spektrální ekvivalence.

Definice 4.1. Mějme dvě SPD matice A, B $(A, B \in \mathbb{R}^{n\times n})$. Jestliže $(\exists\alpha_1 > 0)\,(\exists\alpha_2 > 0)$ takové, že $\forall v \in \mathbb{R}^n$, platí

$$\alpha_1 (Bv, v) \leq (Av, v) \leq \alpha_2 (Bv, v),$$

potom řekneme, že matice A a B jsou **spektrálně ekvivalentní**.

Pokud jsou matice A a B spektrálně ekvivalentní, potom

$$\alpha_1 \leq \frac{\left(B^{-1}Av, v\right)_B}{(v, v)_B} \leq \alpha_2$$

takže musí platit $\alpha_1 \leq \lambda_{\min}\left(B^{-1}A\right)$ a $\lambda_{\max}\left(B^{-1}A\right) \leq \alpha_2$, $cond(B^{-1}A) \leq \alpha_2/\alpha_1$.

Algoritmus 9 (Metoda sdružených gradientů s předpodmíněním zleva)

$u_0 \longleftarrow$
$r_0 = b - A \cdot u_0$
$\tilde{r}_0 = B^{-1}r_0$
$d_0 = \tilde{r}_0$
$\rho_0 = (\tilde{r}_0,\, \tilde{r}_0)_B = (r_0,\, \tilde{r}_0)$
`for` $i = 0, 1, \ldots$
  $w_i = A \cdot d_i$
  $\alpha_i = \rho_i / \left(B^{-1}w_i,\, d_i\right)_B = \rho_i / (w_i,\, d_i)$
  $u_{i+i} = u_i + \alpha_i \cdot d_i$
  $r_{i+1} = r_i - \alpha_i \cdot w_i$
  $\tilde{r}_{i+1} = B^{-1}r_{i+1}$
  $\rho_{i+1} = (\tilde{r}_{i+1},\, \tilde{r}_{i+1})_B = (r_{i+1},\, \tilde{r}_{i+1})$
  `%možná ukončovací podmínka: if` $\rho_{i+1} \leq \varepsilon^2 \cdot \rho_0$ `then STOP,`
  `nebo navíc počítat` $\|r_{i+1}\|$`pro testování` $\|r_{i+1}\| \leq \varepsilon \|r_0\|$
  $\beta_i = \rho_{i+1}/\rho_i$
  $d_{i+1} = \tilde{r}_{i+1} + \beta_i d_i$
`end`

4.2 Předpodmíněná metoda GMRES

Ve standardní metodě GMRES postupně rozšiřujeme již vytvořené a ortonormalizované směry $v_1, \ldots, v_j$ tím, že vytvoříme vektor $w = Av_j$, který dále ortogonalizujeme a normalizujeme. Přitom provádíme minimalizaci

$$u_{i+1} : \min_{v \in u_0 + \mathcal{K}_{i+1}} \|b - Av\|.$$

Předpodmínění zleva

$$w_j = \tilde{A}v_j = B^{-1}Av_j, \text{ t.j. } Bw = Av_j.$$

Budujeme tedy ortonormální bázi prostoru $\mathcal{K}_i(r_0,\, B^{-1}A)$ a používáme podmínku minimalizace

$$u_{i+1} : \min_{\mathcal{K}_{i+1}} \left\|\tilde{b} - \tilde{A}v\right\| = \min_{\mathcal{K}_{i+1}} \left\|B^{-1}(b - Av)\right\|$$

Předpodmínění zprava

$$w_j = \tilde{A}v_j = AB^{-1}v_j$$

Nyní budujeme ortonormální bázi prostoru $\mathcal{K}_i(r_0,\, AB^{-1})$ a používáme podmínku minimalizace

$$u_{i+1} : \min_{\mathcal{K}_{i+1}} \left\|b - \tilde{A}\tilde{v}\right\| = \min_{\mathcal{K}_{i+1}} \|b - Av\|.$$

U GMRES bývá preferováno předpodmínění zprava, které je vhodnější např. v případě, kdy matici B měníme od iterace k iteraci, $B = B_i$. Potom dostáváme pseudo Krylovův prostor, prostor rozšiřujeme následovně

$$w_j = \tilde{A}v_j = AB_j^{-1}v_j.$$

Tato změna nevadí, při minimalizaci využíváme stále stejnou podmínku s normou rezidua. Této variantě se říká flexible GMRES (FGMRES), viz např. [Saad 2003].

Proměnné předpodmínění dostaneme např. přibližným řešením soustavy

$$Aw_j = v_j$$

pomocí vnitřních iterací. Pokud by šlo o pevný počet iterací metodou typu Richardsonovy iterační metody, mohli bychom i zde reprezentovat takové řešení $Aw_j = v_j$ lineárním operátorem B. Pokud však bude počet iterací proměnný, dostaneme proměnné B_j. Při použití CG bude výsledek řešení $Aw_j = v_j$ navíc záviset na v_j nelineárním způsobem.

4.3 Metody konstrukce předpodmínění, štěpení matice

Nejjednodušším štěpením je

$$A = L + D + U,$$

kde L a U jsou dolní a horní trojúhelníková matice, D je diagonální matice.

Jacobiho předpodmínění
Tato metoda používá předpodmínění pomocí matice $B_{JAC} = D$. Její výhodou je jednoduchost, na druhou stranu však nemusí nijak zlepšovat konvergenci metody.

Gauss-Seidelovo předpodmínění
Jako předpodmiňovač zvolíme trojúhelníkovou matici $B_{GS} = L + D$. Soustava $(L + D)\tilde{r} = r$ je také poměrně snadno řešitelná, stačí použít zpětnou redukci.

Symetrické Gaussovo-Seidelovo předpodmínění
Kdybychom chtěli Gaussovo-Seidelovo předpodmínění použít pro CG, nastane problém, neboť takto zvolená matice B_{GS} není SPD. Je však možné použít symetrické Gauss-Seidelovo předpodmínění pomocí matice B_{SGS}, které vznikne propojením dvou iteračních kroků s dolním a horním trojúhelníkovým předpodmíněním

$$\begin{aligned} u_{i+\frac{1}{2}} &= u_i + (L+D)^{-1}(b - Au_i) \\ u_{i+1} &= u_{i+\frac{1}{2}} + (U+D)^{-1}\left(b - Au_{i+\frac{1}{2}}\right). \end{aligned}$$

Potom

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_i + (L+D)^{-1} r_i + (U+D)^{-1}\left(b - Au_i - A(L+D)^{-1} r_i\right) = \\ &= u_i + \left[(L+D)^{-1} + (U+D)^{-1}\left(I - A(L+D)^{-1}\right)\right] \cdot r_i = \\ &= u_i + \left[I + (U+D)^{-1}(L+D-A)\right] \cdot (L+D)^{-1} \cdot r_i = \\ &= u_i + (U+D)^{-1} \cdot [U+D+L+D-A] \cdot (L+D)^{-1} \cdot r_i = \\ &= u_i + (U+D)^{-1} \cdot D \cdot (L+D)^{-1} \cdot r_i \end{aligned}$$

Ve sloučené iteraci se objeví předpodmínění

$$B_{SGS}^{-1} = (U+D)^{-1} \cdot D \cdot (L+D)^{-1},$$

tedy

$$B_{SGS} = (L+D) \cdot D^{-1} \cdot (U+D).$$

Tuto matici B_{SGS} již je možné použít v metodě sdružených gradientů. V každé iteraci řešíme soustavu $B_{SGS}\tilde{r} = r$, což není obtížné, protože známe faktorizaci matice B_{SGS}. Toto předpodmínění ještě vylepšíme v části věnované neúplné faktorizaci.

4.4 Předpodmínění s přímým využitím rozkladu oblasti

Tuto část začneme zavedením blokového Jacobiho předpodmínění $B = D_B$, které vznikne rozdělením matice A na součet blokově dolní trojúhelníkové, diagonální a horní trojúhelníkové matice: $A = L_B + D_B + U_B$, kde

$$D_B = \begin{pmatrix} \ddots & & \\ & A_{ii} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Tomuto rozdělení odpovídá i rozdělení vektorů neznámých, pravé strany a rezidua. Pro předpodmíněné reziduum pak platí

$$\begin{pmatrix} \ddots & & \\ & A_{ii} & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \tilde{r}_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ r_i \\ \vdots \end{pmatrix},$$

tedy $A_{ii}\tilde{r}_i = r_i$. Je vidět výhoda tohoto předpodmínění, bloky $\tilde{r}_i$ lze počítat paralelně.

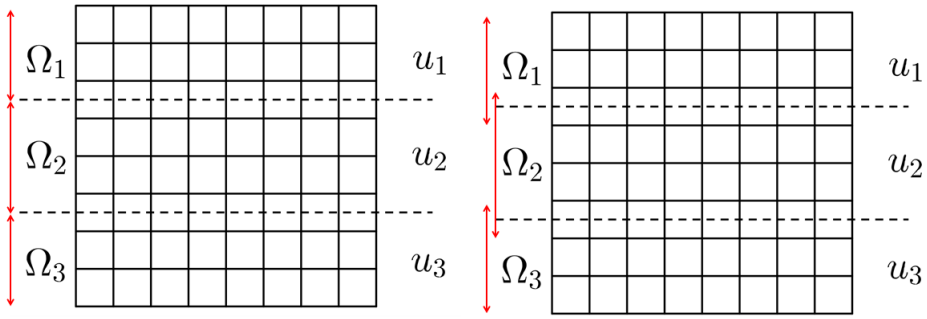
Je otázkou, jakým způsobem provést rozdělení matice a vektorů do bloků. Pokud řešená soustava souvisí s modelováním fyzikálních procesů na oblasti Ω a toto modelování vede k řešení parciálních diferenciálních rovnic, což je realizováno např.

pomocí metody konečných prvků nebo konečných diferencí, potom je přirozené provést rozdělení do bloků v souvislosti s rozdělením Ω na několik podoblastí Ω_i,

$$\Omega = \bigcup_{i=1}^{s} \Omega_i.$$

S vazbou na rozdělení oblasti pak pracuje řada metod, které jsou velmi důležité pro efektivní paralelní řešení soustav vznikajících při matematickém modelování procesů na podoblastech. Některé z metod zhruba představíme v našem kurzu, více např. [Saad 2003], [Toselli, Widlund 2005].

Příklad 4.1. Oblast Ω je rozdělena na podoblasti $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$. Neznámé odpovídající uzlům sítě a vektor řešení jsou takto rozděleny do tří skupin/bloků.

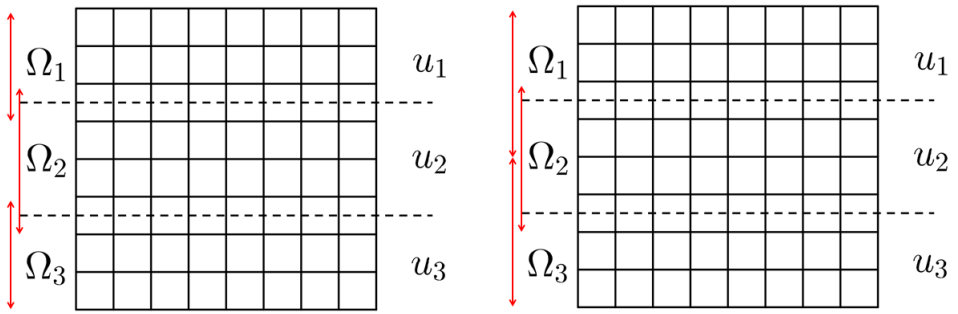


Obrázek 2: (Vlevo) Rozdělení oblasti implikující rozdělení vektorů a matice na bloky. (Vpravo) Rozdělení oblasti s (minimálním) překrytím umožňující interpretaci diagonálních bloků jako matic soustav vznikajících řešením úloh nad podoblastmi (s Dirichletovými okrajovými podmínkami na vnitřních hranicích).

Pokud má předpodmínění fungovat, musí být pracnost aplikace předpodmínění, tedy pracnost řešení soustav $A_{ii}\tilde{r}_i = r_i$, malá ve srovnání s řešením celé soustavy. To může být zaručeno různě, např. použitím pásového algoritmu Gaussovy eliminace s počtem operací úměrným $n_i \cdot b_i^2$. Pro dělení v příkladu 4.1, bude $n_i = n/3$, $b_i = 3$. Pokud budeme zvyšovat počet podoblastí, ale nebudeme zvětšovat počet vrstev $b_i \leq b$, bude pracnost výpočtu $\tilde{r}_i$ použitím pásového algoritmu s vhodným pásovým očíslováním úměrná

$$\sum_{k=1}^{m} (n/k) b_k^2 \leq b^2 n = O(n).$$

Co se týče čísla podmíněnosti při použití blokově diagonálního předpodmínění, lze představu získat použitím Věty 4.2 (viz dále). Tato věta nám zároveň umožní porozumět potřebě většího překrytí, které nyní popíšeme.



Obrázek 3: (Vlevo) Rozložení s minimálním překrytím $\delta = h$. (Vpravo) Rozložení s větším překrytím, $\delta = 2h$.

Schwarzova metoda rozložení

Schwarzova metoda rozložení umožňuje uvažovat rozdělení na podoblast s větším překrytím, viz např. Obr. 3.

Pro zápis metody nyní nestačí prosté rozdělení do bloků, ale potřebujeme poněkud obecnější formalizmus. Uvažujeme o úlohách s n neznámými odpovídajícími uzlům. Množinu indexů rozložíme tak, že

$$\{1, \ldots, n\} = I_1 \cup \ldots \cup I_m. \tag{25}$$

V případě blokově diagonálního předpodmínění v (25) platí $I_k \cap I_l = \emptyset$ pro $k \neq l$, při rozložení s větším překrytím však tato disjunktnost již neplatí. S rozdělením neznámých můžeme spojit podprostory

$$V_k = \left\{ \sum_{j \in I_k} \xi_j e_j : \ \xi_j \in R \right\}.$$

Jako e_j značíme vektory standardní báze $e_j = (\delta_{1j}, \ldots, \delta_{nj})^T \in R^n$, δij je Kroneckerovo δ. Platí

$$V = R^n = V_1 + \ldots + V_m,$$

přičemž tento součet je direktním součtem v případě disjunktních I_k. S rozdělením prostoru souvisí operátory restrikce

$$R_k : R^n \to V_k, \ \dim V_k = n_k.$$

Operátor restrikce je reprezentován maticí nul a jedniček R_k o rozměrech $n_k \times n$. V každém řádku matice R_k je právě jedna jednička.

Na základě R_k lze definovat operátor prodloužení,

$$R_k^T : V_k \to R^n$$

a matice úloh na podoblastech

$$A_k = R_k A R_k^T.$$

Příklad 4.2. (Restrikce)

$$\begin{pmatrix} a & b & d & e \\ f & g & i & j \\ p & q & s & t \\ u & v & y & z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & c & d & e \\ f & g & h & i & j \\ k & l & m & n & o \\ p & q & r & s & t \\ u & v & x & y & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Jako předpodmiňovač můžeme nyní použít matici B, pro níž platí

$$B^{-1} = \sum_k R_k^T A_k^{-1} R_k.$$

Tak získáváme aditivní Schwarzovo předpodmínění, které je zobecněním blokově diagonálního předpodmínění.

Platí

- pokud A je SPD, potom A_k jsou SPD,
- B je SPD. Symetrie a nezápornost jsou jasné. Navíc

$$0 = \left(B^{-1}v,\, v\right) = \sum_k \left(A_k^{-1} R_k v,\, R_k v\right) \Rightarrow R_k v = 0\ \forall k \Rightarrow v = 0.$$

- Pro $P_k = R_k^T A_k^{-1} R_k A$ platí

$$B^{-1}A = \sum_k R_k^T A^{-1} R_k A = \sum_k P_k,$$

$$P_k^2 = R_k^T A_k^{-1} \underbrace{R_k A R_k^T}_{A_k} A^{-1} R_k A = P_k,$$

- pro SPD matice A je

$$(P_k v,\, w)_A = \left(A R_k^T A_k^{-1} R_k A v,\, w\right) = \left(Av,\, R_k^T A_k^{-1} R_k A w\right) = (v,\, P_k w)_A$$

Zjistili jsme, že P_k jsou projekce symetrické vůči skalárnímu součinu indukovanému A. Jsou tedy ortogonální.

$$\|v\|_A^2 = \|P_i v\|_A^2 + \|(I - P_i)\, v\|_A^2$$

a $\|P_i\|_A = 1$.

Věta 4.2. *Předpokládejme, že A je SPD a že existují konstanty $k_0 > 0$ a $k_1 > 0$ tak, že platí*

$$\forall v \in U\ \exists v_i \in U_i :\ v = \sum R_i^T v_i\ \ a\ \ \sum \|v_i\|_{A_i}^2 \le k_0 \|v\|_A^2, \tag{26}$$

$$\forall v \in U\ \forall v_i \in U_i :\ v = \sum R_i^T v_i\ \ je\ \ \|v\|_A^2 \le k_1 \sum \|v_i\|_{A_i}^2. \tag{27}$$

Potom

$$\frac{1}{k_0} (v, v)_A \le \left(B^{-1}Av, v\right)_A \le k_1 (v, v)_A, \tag{28}$$

tedy

$$\frac{1}{k_0} \le \lambda_{\min}\left(B^{-1}A\right),\ \ \lambda_{\max}\left(B^{-1}A\right) \le k_1,\ \ cond(B^{-1}A) \le k_0 k_1.$$

Důkaz. Dokažme první nerovnost (28). S využitím rozkladu $v = \sum v_i$ z (26) dostaneme

$$\begin{aligned}
(v, v)_A &= \sum_i \left(v,\, R_i^T v_i\right)_A = \sum_i \left(v,\, P_i R_i^T v_i\right)_A = \sum_i \left(P_i v,\, R_i^T v_i\right)_A \\
&\le \sum_i \sqrt{(P_i v,\, P_i v)_A} \cdot \sqrt{\left(R_i^T v_i,\, R_i^T v_i\right)_A} \\
&\le \left\{\sum_i (P_i v,\, P_i v)_A\right\}^{\frac{1}{2}} \left\{\sum_i \left\|R_i^T v_i\right\|_A^2\right\}^{\frac{1}{2}} \\
&= \left\{\sum_i (P_i v,\, v)_A\right\}^{\frac{1}{2}} \left\{\sum_i \|v_i\|_{A_i}^2\right\}^{\frac{1}{2}} \\
&\le \left\{\left(B^{-1}Av,\, v\right)_A\right\}^{\frac{1}{2}} \left\{k_0 (v,\, v)_A\right\}^{\frac{1}{2}},
\end{aligned}$$

tedy

$$\frac{1}{k_0} (v, v)_A \le \left(B^{-1}Av, v\right)_A.$$

Opačně, vezměme $v \in \mathbb{R}^n$ a definujme $w_i = P_i v / \|P_i v\|_A$. Potom

$$\begin{aligned}
\left(B^{-1}Av, v\right)_A &= \sum_i (P_i v, v)_A = \sum_i (w_i, v)_A \|P_i v\|_A \\
&\le \sqrt{\sum_i (w_i,\, v)_A^2} \sqrt{\sum_i \|P_i v\|_A^2} \qquad (29) \\
&\le \sqrt{k_1 \|v\|_A^2} \sqrt{\sum_i (P_i v, v)_A} \qquad (30) \\
&= \sqrt{k_1 \|v\|_A^2} \sqrt{(B^{-1}Av, v)_A},
\end{aligned}$$

odtud

$$\left(B^{-1}Av, v\right)_A \le k_1 (v, v)_A.$$

V 30 jsme využili nerovnost $\sum_i (w_i,\, v)_A^2 \le k_1 \|v\|_A^2$. Tu musíme dokázat s využitím podmínky (27). $\sum_i (w_i,\, v)_A^2 = \|Zv\|^2$, kde Z je zobrazení definované předpisem

$$Z :\ V \to R^n,\ \ Z :\ z \to [(z,\, w_i)_A]_{i=1}^n.$$

Pokud uvažujeme $\mathbb{R}^n$ jako prostor se standardním eukleidovským skalárním součinem a V jako prostor $\mathbb{R}^n$ s energetickým skalárním součinem $(\cdot,\,\cdot)_A$, potom má adjungovaný operátor $Z^\star$ tvar

$$Z^\star : \mathbb{R}^n \to V,\;\; Z^\star : \xi \to \sum \xi_i w_i.$$

Adjungovanost Z a $Z^\star$ je dána rovností

$$(Zv,\,\xi) = \sum \xi_i \,(v,\,w_i)_A = \Big(v,\,\sum \xi_i w_i\Big)_A = (v,\,Z^\star\xi)_A \quad \forall v \in V,\; \xi \in \mathbb{R}^n.$$

Podmínka (27) nám umožňuje odhadnout normu

$$\|Z^\star\xi\|_A^2 = \Big\|\sum \xi_i w_i\Big\|_A^2 \overset{\star}{\leq} k_1 \sum \xi_i^2 \,\|w_i\|_{A_i}^2 \overset{\star\star}{=} k_1 \sum \xi_i^2 = k_1 \,\|\xi\|^2,$$

v $\star$ využíváme (27), v $\star\star$ jednotkovou normu w_i plynoucí z definice. Dále

$$\|Zv\| = \max_{\xi\in\mathbb{R}^n}(Zv,\,\xi) = \max_{\xi\in R^n}(v,\,Z^\star\xi)_A \leq \|v\|_A \max_{\xi\in R^n} \|Z^\star\xi\|_A \leq \|v\|_A \,\sqrt{k_1},$$

odkud plyne požadovaný odhad

$$\sum_i (w_i,\,v)_A^2 = \|Zv\|^2 \leq k_1 \,\|v\|_A^2$$

(obecněji využíváme $\|Z\| = \|Z^\star\|$). □

Zamysleme se nad (26). Zřejmě

$$\|v\|_A^2 = \Big(\Big\|\sum v_i\Big\|_A\Big)^2 \leq \Big(\sum \|v_i\|_A\Big)^2 \leq \sum 1^2 \sum \|v_i\|_{A_i}^2 \leq m \sum \|v_i\|_{A_i}^2 .$$

Triviálním odhadem je tedy $k_1 = m$. To není příliš uspokojivé, neboť tento odhad se zvětšuje s počtem podprostorů (podoblastí) m. Uvažujme

$$\varepsilon_{kl} = \cos(V_k, V_l) = \sup\{(v_k, v_l)_A \colon\; v_k \in V_k,\; v_l \in V_l,\;\; \|v_k\|_A = 1,\;\; \|v_l\|_A = 1\},$$

tedy $\varepsilon_{kl} = 1$, pokud mají V_k a V_l netriviální průnik $V_k \cap V_l \neq \{0\}$, a $\varepsilon_{kl} = 0$ v opačném případě. Zřejmě

$$\|v\|_A^2 = \Big(\sum R_k^T v_k,\, \sum R_l^T v_l\Big)_A \leq \sum_{kl} \big(R_k^T v_k,\, R_l^T v_l\big)_A \leq$$

$$\leq \sum_{kl} \varepsilon_{kl} \|v_k\|_{A_k} \|v_l\|_{A_l} \leq \rho \sum \|v_k\|_{A_k}^2 ,$$

kde

$$\rho = \rho(\varepsilon_{kl}) \leq \|(\varepsilon_{kl})\| = \max_k \sum_l \varepsilon_{kl}$$

To dává k_1 jako maximální počet prostorů s netriviálním průnikem nebo maximální počet překrývajících se oblastí. V dělení podle Příkladu (4.1) je tedy $k_1 = 3$.

Nyní se zamysleme nad opačnou nerovností $\sum \|v_i\|_{A_i}^2 \leq k_0 \,\|v\|_A^2$. Uvažujme modelovou úlohu (14). Pro vektor

$$v \in R^n :\;\; v_i = 1 \;\forall i$$

bude

$$(Av)_i = 0 \;\; \forall i \neq 1, n \;\;\; a \;\;\; (Av)_i = 1/h^2 \;\; \forall i = 1, n \;\; a \;\; \|v\|_A = \sqrt{2/h^2}.$$

V případě rozdělení na m podoblastí s minimálním překrytím bude $\|v_i\|_{A_i} = \sqrt{2/h^2}$ pro všechna $i = 1, \ldots, m$, takže vychází $k_0 \sim m$. V případě většího překrytí se situace zlepší. Podstatné zlepšení pak přinese až doplnění dalšího prostoru, který odpovídá diskretizaci na hrubé síti, tedy obdoba multigridní metody.

Hlavní operací je řešení soustavy $B\tilde{r} = r$. Platí

$$\tilde{r} = B^{-1} r = \sum_i R_i^T A_i^{-1} R_i r.$$

Pro řešení soustav s maticemi A_i lze použít přímou metodu, například Gaussovu eliminaci. Takto získaná metoda tedy bude kombinací iteračního a přímého řešiče. Kombinace iteračních a přímých metod se objevují i v dalších technikách předpodmínění.

4.4.1 Metoda Schurova doplňku

Matici

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

můžeme faktorizovat tímto způsobem:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ A_{21}A_{11}^{-1} & I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 & A_{11}^{-1}A_{12} \\ 0 & I_2 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ A_{21} & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 & A_{11}^{-1}A_{12} \\ 0 & I_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & S + A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} \end{pmatrix}, \qquad (31)$$

kde I_1 a I_2 jsou jednotkové matice, které obecně mohou mít různou velikost. Matici

$$S = A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} \qquad (32)$$

nazýváme Schurův doplněk.

Pro předpodmínění využijeme předchozí rozklad, místo matice A_{11} a Schurova doplňku S však budeme pracovat s aproximacemi $\tilde{A}_{11}$ a $\tilde{S}$.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \;\sim\; \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ A_{21}\tilde{A}_{11}^{-1} & I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 & \tilde{A}_{11}^{-1}A_{12} \\ 0 & I_2 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & 0 \\ A_{21} & \tilde{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 & \tilde{A}_{11}^{-1}A_{12} \\ 0 & I_2 \end{pmatrix} = B$$

Tuto matici B použijeme jako předpodmiňovač.

V každé iteraci tedy budeme řešit soustavu pro pseudoreziduum $B\tilde{r} = r$. Díky předchozímu rozkladu matice B lze tento vypočet rozdělit do dvou kroků.

1. krok:

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & 0 \\ A_{21} & \tilde{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} r_1 = \tilde{A}_{11} w_1 \quad &\Rightarrow \quad w_1 = \tilde{A}_{11}^{-1} r_1 \\ r_2 = A_{21} w_1 + \tilde{S} w_2 \quad &\Rightarrow \quad w_2 = \tilde{S}^{-1}(r_2 - A_{21} w_1) \end{aligned}$$

2. krok:

$$\begin{pmatrix} I_1 & \tilde{A}_{11}^{-1} A_{12} \\ 0 & I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{r}_1 \\ \tilde{r}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} w_2 &= \tilde{r}_2 \\ w_1 = \tilde{r}_1 + \tilde{A}_{11}^{-1} A_{12} \tilde{r}_2 \quad &\Rightarrow \quad \tilde{r}_1 = w_1 - \tilde{A}_{11}^{-1} A_{12} w_2. \end{aligned}$$

Dalším zjednodušením může být blokově diagonální předpodmínění

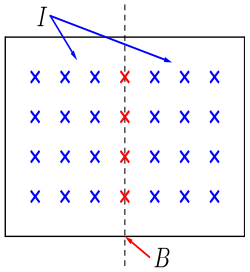
$$B_D = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & 0 \\ 0 & \tilde{S} \end{pmatrix}.$$

Zatím hovoříme obecně o případu s dělením na dva bloky/podprostory. Speciální je např. metoda rozložení oblasti, kdy je bloková struktura matice A dána rozdělením oblasti na vnitřní a hraniční uzly, viz Obr. 4. Matice A má tedy strukturu

$$A = \begin{pmatrix} A_{II} & A_{IB} \\ A_{BI} & A_{BB} \end{pmatrix},$$

kde A_{II} je blokově diagonální matice. Je-li například oblast rozdělena na dvě podoblasti, platí

$$A_{II} = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} \end{pmatrix}.$$



Obrázek 4: Rozdělení oblasti na dvě podoblasti, znázorněny vnitřní a hraniční uzly

V tomto případě je vhodné soustavu předpodmínit maticí

$$B = \begin{pmatrix} A_{II} & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix},$$

kde $S = A_{BB} - A_{BI} A_{11}^{-1} A_{IB} - A_{B2} A_{22}^{-1} A_{2B}$. Matice S je menší a lépe podmíněná než A, ale hustá. Pro přímé řešení soustavy s S musíme soustavu sestavit, což může být problém. Pokud řešíme soustavu s S iteračně, využíváme fakt, že $S = S_1 + S_2$, kde S_i je část S sestavená z diskretizaci na i-té podoblasti. Navíc, pokud jsou S_i regulární lze sestavit z inverzí S_i předpodmiňovač $B^{-1} = S_1^{-1} + S_2^{-1}$. Takový předpodmiňovač je analogií Schurova předpodmínění, nyní ale pro Schurův doplněk. I jej lze doplnit hrubým prostorem pro zvýšení efektivity. Více viz [Saad 2003, Toselli, Widlund 2005].

Schurův doplněk lze pro předpodmínění využít i v případě, kdy je oblast diskretizována pomocí hrubé sítě a poté pomocí jemné. Jednotlivé uzly je pak opět možné rozdělit do dvou skupin, viz AMLI metoda [Axelsson 1994]. Techniku Schurova doplňku použijeme také u sedlobodových soustav.

4.5 Předpodmínění využívající neúplnou faktorizaci

Použitím neúplné faktorizace, zkráceně ILU z angl. incomplete LU, získáme opět předpodmínění modifikací přímého řešiče.

Algoritmus 10 LU rozklad bez pivotace.

```
for k = 1, ..., n-1
    for i = k+1, ..., n
        l = a_ik / a_kk        ❶
        a_ik = l               ❷
        for j = k+1, ..., n
            a_ij = a_ij - l · a_kj      ❸
        end
    end
end
```

Pokud je matice A SPD, dá se dokázat, že nikdy nenastane $a_{kk} = 0$ (nebudeme dělit nulou), nemusíme tedy provádět pivotizaci.

Metoda ILU

Pro účely předpodmínění není třeba provádět přímo LU rozklad, stačí najít přibližný rozklad $B = \tilde{L}\tilde{U} \sim A$ a použít jej jak předpodmiňovač. Implementace - výpočet pseudoresidua

$$B\tilde{r} = r, \quad \text{t.j. } \tilde{L}\tilde{U}\tilde{r} = r$$

provedeme ve dvou krocích provedením přímého a zpětného chodu

$$\begin{aligned} \tilde{L} w &= r, \quad w = \tilde{L}^{-1} r, \\ \tilde{U} \tilde{r} &= w, \quad \tilde{r} = \tilde{U}^{-1} w. \end{aligned}$$

Označme P množinu vybraných pozic, tedy $P \subset \{(i,j) : i,j = 1,\ldots,n\}$. Operace ❶ a ❷ budeme provádět, jen když $(i,k) \in P$. Klíčovou operací je operace ❸,

tu provedeme, jen když $(i,j) \in P$. Množina P je tedy množinou právě těch pozic, na nichž povolujeme zaplnění matice. Tak dostaneme přibližné trojúhelníkové faktory, přičemž bude platit

$$\tilde{L}\tilde{U} - A = R$$

$$R_{ij} = 0 \qquad (i,j) \in P$$

Metoda MILU

Další možností je nahradit operaci ❸ operací $a_{ii} = a_{ii} + l \cdot a_{kj}$ Takto získaná metoda se nazývá modifikovaná ILU metoda, zkráceně MILU. V tomto případě platí

$$Re = 0,\ e = (1,\ldots,1)^T,$$

t.j.

$$Ae = \left(\sum_j a_{ij}\right) = \tilde{L}\tilde{U}e.$$

Metoda ILUT

Jinou variantou je vytvářet množinu pozic dynamicky. Kroky ❶ a ❷ provádíme, pokud je splněna podmínka $|l| > \varepsilon$, v opačné případě nastavíme $a_{ik} = 0$. Tato metoda má zkratku ILUT, kde T znamená zadanou mez (threshold) ε.

Metody ILU(0), MILU(0)

Jako množinu pozic často volíme $P_0 = \{(i,j) : a_{ij} \neq 0\}$, získáme tak metody ILU(0), MILU(0). V těchto metodách tedy nevytváříme nenulové prvky tam, kde původně byly nulové.

Metody ILU(0*), MILU(0*)

vzniknou když vezmeme množinu pozic $P_0 = \{(i,j) : a_{ij} \neq 0\}$ a vůbec neměníme prvky mimo diagonálu. Symetrickou matici A můžeme rozložit jako

$$A = D - L - L^T,$$

kde D je diagonální a L je ostře dolní trojúhelníková část. Chceme pak dostat faktorizaci (předpodmínění) ve tvaru

$$B = (X - L)\, X^{-1}\, (X - L)^{-1},$$

kde X je diagonální matice. Jde o zobecnění symetrického Gaussova-Seidelova předpodmínění, které vznikne volbou $X = D$.

Požadujeme, aby šlo o MILU metodu, tedy aby se řádkové součty rovnaly, $Be = Ae$, kde $e = (1,\ldots,1)^T$. Z této podmínky určíme diagonální matici X.

$$\begin{aligned} B &= (X - L)\, X^{-1}\, (X - L)^{-1} = \left(I - LX^{-1}\right)\left(X - L^T\right) \\ &= X - L - L^T + LX^{-1}L^T \end{aligned}$$

Podmínka $Be = Ae$ tedy přejde do formy $De = Xe + LX^{-1}L^Te$, kde De je vektor diagonálních hodnot A. Pokud označíme $w = L^Te$ vektor řádkových součtů ostře horní trojúhelníkové části A, bude po složkách platit

$$a_{ii} = x_{ii} + \left(LX^{-1}w\right)_i.$$

Dále využijeme toho, že matice L je trojúhelníková a vyjádříme předpis pro určení prvků diagonální matice

$$x_{ii} = a_{ii} - \left(LX^{-1}w\right)_i = a_{ii} - \sum_j L_{ij}\frac{1}{x_{jj}}w_j = a_{ii} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\frac{1}{x_{jj}}w_j. \qquad (33)$$

Vzorec (33) můžeme použít pro postupný výpočet prvků diagonální matice X, při výpočtu x_{ii} potřebujeme znát předchozí $x_{jj},\ j < i$. Výpočet bude korektní pokud $x_{jj} \neq 0$.

Požadavek, aby předpodmiňovač B byl SPD, je ekvivalentní požadavku, aby matice X byla SPD, tedy $x_{ii} > 0$. To ale neplatí automaticky. Pokusíme se tedy najít podmínky, které zaručí, že matice B bude SPD. Podmínky budeme hledat v souvislosti s řešením modelových úloh.

Například úloha $-u'' = f$ vede po diskretizaci na matici

$$A_1 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Řádkové součty této matice jsou nezáporné, tedy $Ae \geq 0$, a navíc platí $(-L + D)\, e > 0$. Obdobně, úloha $-\Delta u = f$ vede po diskretizaci na matici obdobných vlastností,

$$A_2 = \begin{pmatrix} M & -I & & \\ -I & M & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I \\ & & -I & M \end{pmatrix},\ \text{kde } M = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & 4 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ & & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

a I je jednotková matice.

Věta 4.3. *Nechť $L \geq 0$, $Ae \geq 0$ a $(D - L)e > 0$, kde nerovnost mezi vektory či maticemi znamená nerovnost mezi odpovídajícími prvky. Potom platí*

$$x_{ii} \geq \left[(D - L)\, e\right]_i = \left[\left(A + L^T\right) e\right]_i > 0.$$

Takže matice X a $B = (X - L)\, X^{-1}\, (X - L)^{-1}$ jsou SPD.

Důkaz (matematickou indukcí):

1. $\underline{i = 1:}$

$$x_{11} = a_{11} = (Ae)_1 + \left(L^Te\right)_1 > 0$$

2. $\underline{i>1:}$ Připomeňme, že $w = L^T e$. Podle indukčního předpokladu pro $j < i$ platí $x_j > 0$, $w_j > 0$ a $x_j \geq (Ae)_j + \left(L^T e\right)_j \geq \left(L^T e\right)_j = w_j$, tedy $\frac{1}{x_j} w_j \leq 1$. Formule (33) potom dává

$$x_{ii} = a_{ii} + \sum_{j=1}^{i-1} \underbrace{a_{ij}}_{\leq 0} \underbrace{\frac{1}{x_j}}_{\geq 0} \underbrace{w_j}_{\geq 0} \geq a_{ii} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} = \left[(D-L)\, e\right]_i > 0.$$

□

Za předpokladů Věty (4.3) platí $x_{ii} \geq w_i$. Zesílením této podmínky dojdeme k tvrzení, které můžeme použít k analýze efektu předpodmínění.

Věta 4.4. *Nechť platí předpoklady Věty (4.3) a existuje $\delta > 0$ tak, že platí*

$$x_{ii} \geq (1+\delta)\, w_i.$$

Potom

$$B \leq A \leq \frac{1+\delta}{\delta} B$$

kde nerovnosti mají energetický význam, tedy představují spektrální ekvivalenci

$$(Bx, x) \leq (Ax, x) \leq \frac{1+\delta}{\delta} (Bx, x) \quad \forall x \in R^n.$$

Důkaz. Dokažme první nerovnost $(Bx, x) \leq (Ax, x)$. Využijeme pomocné tvrzení: Nechť M je symetrická matice a x vektor příslušné délky. Potom pro skalární součin (Mx, x) platí:

$$\begin{aligned}
(Mx, x) &= \sum_i \sum_j M_{ij} x_j x_i = \sum_{ij} M_{ij} \left(-\frac{1}{2} (x_i - x_j)^2 + \frac{1}{2} x_i^2 + \frac{1}{2} x_j^2 \right) = \\
&= \sum_{i \neq j} -\frac{1}{2} M_{ij} (x_i - x_j)^2 + \sum_i \left(\sum_j \frac{1}{2} M_{ij} \right) x_i^2 + \sum_j \left(\sum_i \frac{1}{2} M_{ij} \right) x_j^2 = \\
&= \sum_{i<j} -M_{ij} (x_i - x_j)^2 + \sum_i \left(\sum_j M_{ij} \right) x_i^2 \text{ (díky symetrii matice } M)
\end{aligned}$$

Odvozenou formuli aplikujeme na zbytek $R = B - A$. Víme, že $Re = Be - Ae = 0$. Tedy

$$(Rx, x) = \sum_{i<j} -R_{ij} (x_i - x_j)^2 + \sum_i \left(\sum_j R_{ij} \right) x_i^2 = \sum_{i<j} -R_{ij} (x_i - x_j)^2$$

Pro $i \neq j$ bude

$$\begin{aligned}
R_{ij} &= \left[(X-L) X^{-1} \left(X - L^T\right) - D + L + L^T\right]_{ij} = (X-D)_{ij} + \left(L X^{-1} L^T\right)_{ij} \\
&= \left(L X^{-1} L^T\right)_{ij} = \left(L X^{-1} L^T e_j,\, e_i\right) = \left(X^{-1} L^T e_j,\, L^T e_i\right) \geq 0
\end{aligned}$$

Proto platí

$$(Rx,\, x) \leq 0 \Rightarrow R = B - A \leq 0 \Rightarrow B \leq A \text{ (v energetickém smyslu).}$$

Druhá nerovnost se dokáže poněkud složitěji. □

Poznámka 4.1. Využívali jsme $a_{ij} = (Ae_j,\, e_i)$, kde e_i a e_j jsou vektory standardní báze.

S využitím výše uvedené věty a vhodné diagonání modifikace lze pro matice vycházející z řešení modelových úloh ukázat, že při použití předpodmínění pomocí MILU(0*) je $cond(B^{-1}A) = O(h^{-1})$ místo $cond(A) = O(h^{-2})$.