

Итерационные методы для решения линейных систем

Игорь Лобанов

май 2021

Метод Галеркина

Приближенное решение $x_m \in x_0 + K_m$ системы:

$$Ax = b,$$

где x_0 – начальное приближение и K_m пространство размерности m , можно найти удовлетворив условиям Петрова-Галеркина:

$$b - Ax_m \perp L_m,$$

где L_m еще одно пространство размерности m .

В итерационных методах пространством K_m обычно выбирают пространство Крылова:

$$K_m = K_m(A, r_0) = \text{span}(r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{m-1}r_0).$$

где $r_0 = b - Ax_0$ – начальная невязка.

Метод подпространств Крылова аппроксимирует решение полиномом q_{m-1} степени $m - 1$:

$$A^{-1}b \approx x_m = x_0 + q_{m-1}(A)r_0$$

Выбор подпространства L_m зависит от свойств матрицы A и от выбора минимизируемой ошибки. Стандартный выбор:

1. $L_m = K_m$ для положительно определенного $A > 0$;
2. $L_m = AK_m$ для A общего вида.

Подпространства Крылова

$$K_m(A, v) = \text{span}(v, Av, A^2v, \dots, A^{m-1}v).$$

1. Элементы K_m имеют вид $x = p(A)v$ для подходящего многочлена p , $\deg p \leq m - 1$.
2. Наименьшая из степеней многочленов p , таких что $p(A)v = 0$ называется степенью v относительно A . Если μ степень v , то K_μ инвариантно относительно A и $K_m = K_\mu$ для $m \geq \mu$. Более того,

$$\dim K_m = m \quad \Leftrightarrow \quad m \leq \mu.$$

4. Пусть Q_m проектор на K_m и $A_m = Q_m A \Big|_{K_m}$ сужение A на K_m , тогда для любого многочлена q , $\deg q \leq m$ верно $Q_m q(A)v = q(A_m)v$, а для $\deg q \leq m - 1$ верно $q(A)v = q(A_m)v$.

Алгоритм Арнольди

1. Выберем v_1 , $\|v_1\| = 1$.
2. Повторяем для $j = 1 \dots m$:
3. Вычислим $h_{ij} = Av_j \cdot v_i$ для $i = 1 \dots j$.
4. Вычислим $w_j = Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij} v_i$.
5. Положим $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$.
6. Если $h_{j+1,j} = 0$, то завершаем алгоритм.
7. В противном случае $v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j}$.

Шаги 3-7 суть процесс ортогонализации Грама-Шмидта.

Вектора $v_1 \dots v_m$ образуют ортогональный базис в K_m , если алгоритм не прервался до $j \leq m$.

Соберем вектора v_j в столбцы матрицы $V_m = (v_1, \dots, v_m) \in \text{Mat}(n \times m)$. Пусть $\bar{H} \in \text{Mat}((m+1) \times m)$ – матрица Хессенберга с элементами h_{ij} , а H – первые m строк матрицы \bar{H} . Тогда

$$AV_m = V_m H_m + w_m e_m^T = V_{m+1} \bar{H}_m,$$

$$V_m^T AV_m = H_m.$$

Алгоритм Арнольди прерывается на шаге j ($h_{j+1,j} = 0$), если и только если j степень v_1 относительно A .

Практичный вариант алгоритма Арнольди

1. Выберем v_1 , $\|v_1\| = 1$.
2. Повторяем для $j = 1 \dots m$:
3. Вычислим $w_j = Av_j$.
4. Повторяем для $i = 1 \dots j$:
5. Вычислим $h_{ij} = w_j \cdot v_i$.
6. Обновим $w_j \mapsto w_j - h_{ij}v_i$.
7. Положим $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$.
8. Если $h_{j+1,j} = 0$, то завершаем алгоритм.
9. В противном случае $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$.

В приближенной арифметике ортогональность векторов в этом варианте лучше. Еще лучше использовать отражения Хаусхолдера, вместо Грама-Шмидта, но они в два раза медленнее.

Метод полной ортогонализации (FOM)

Решаем систему $Ax = b$ методом Галеркина, положив $L_m = K_m = K_m(A, r_0)$, где $r_0 = b - Ax_0$ для начального приближения x_0 . Приближенное решение x_m ищется в пространстве $x_0 + K_m \ni x_m$ из условий Галеркина $b - Ax_m \perp K_m = L_m$.

1. Положим в алгоритме Арнольди $v_1 = r_0/\beta$, $\beta = \|r_0\|$, и пусть V_m ортонормированный базис, порожденный алгоритмом Арнольди, и H соответствующая матрица Хессенберга. Тогда

$$V_m^T A V_m = H_m, \quad V_m^T r_0 = V_m^T (\beta v_1) = \beta e_1.$$

2. Приближенное решение находится решением системы из m уравнений:

$$x_m = x_0 + V_m y_m, \quad H_m y_m = \beta e_1.$$

Невязка приближенного решения:

$$b - Ax_m = -h_{m+1,m} e_m^T y_m v_{m+1},$$

$$\|b - Ax_m\|_2 = h_{m+1,m} |e_m^t \cdot y_m|.$$

Здесь e_m – m -ый столбец единичной матрицы.

FOM с перезапуском

1. Вычислим $r_0 = b - Ax_0$, $\beta = \|r_0\|_2$, $v_1 = r_0/\beta$.
2. Вычисляем базис Арнольди V и матрицу Хессенберга H_m стартуя с вектора v_1 .
3. Решаем систему $H_m y_m = \beta e_1$ и получаем приближенное решение $x_m = x_0 + V_m y_m$.
4. Если полученная точность устраивает, то останавливаемся.
5. Если нет, то кладем $x_0 = x_m$ повторяем с шага 1.

Частичная ортогонализация (IOM)

1. Повторяем для $j = 1 \dots m$:
2. Вычислим $w_j = Av_j$.
3. Повторяем для $i = \max(1, j - k + 1) \dots j$:
4. $h_{ij} = w_j \cdot v_i$.
5. $w_j \mapsto w_j - h_{ij}v_i$.
6. $h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$, $v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$.

Ортогонализуем только относительно k последних векторов.
Однако для вычисления решения по прежнему требуются все m векторов:

$$x_m = x_0 + V_m y_m.$$

Однопроходный метод (DIOM)

Матрица Хессенберга H_m из неполной ортогонализации (IOM) имеет одну побочную нижнюю диагональ и k побочных верхних. Используем LU разложение $H_m = L_m U_m$,

$$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & & \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} & \\ & h_{32} & h_{33} & h_{34} & h_{35} \\ & & h_{43} & h_{44} & h_{45} \\ & & & h_{54} & h_{55} \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ & l_{32} & 1 & & \\ & & l_{43} & 1 & \\ & & & l_{54} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & & \\ & u_{22} & u_{23} & u_{24} & \\ & & u_{33} & u_{34} & u_{35} \\ & & & u_{44} & u_{45} \\ & & & & u_{55} \end{pmatrix}$$

Приближенное решение

$$x_m = x_0 + V_m U_m^{-1} L_m^{-1}(\beta e_1).$$

Обозначим $P_m = (p_1 \dots p_m) = V_m U_m^{-1}$, $z_m = L_m^{-1}(\beta e_1)$, тогда

$$x_m = x_0 + P_m z_m.$$

Вектора P_m можно вычислить рекуррентно:

$$P_m U_m = V_m, \quad \sum_{i=m-k+1}^m u_{im} p_i = v_m,$$

$$p_m = \frac{1}{u_{mm}} \left[v_m - \sum_{i=m-k+1}^{m-1} u_{im} p_i \right].$$

При увеличении m левый верхний диагональный минор матриц H_m и L_m не изменяется. Следовательно справедливо:

$$z_m = \begin{pmatrix} z_{m-1} \\ \zeta_m \end{pmatrix}, \quad \zeta_m = -l_{m,m-1}\zeta_{m-1}.$$

Приближенное решение:

$$x_m = x_0 + P_{m-1}z_{m-1} + \zeta_m p_m.$$

Так как $x_0 + P_{m-1}z_{m-1} = x_{m-1}$, то приближенные решения обновляются по формуле:

$$x_m = x_{m-1} + \zeta_m p_m.$$

Однопроходный метод без запоминания (DIOM)

1. Выберем x_0 и вычислим $r_0 = b - Ax_0$, $\beta = \|r_0\|_2$, $v_1 = r_0/\beta$.
2. Цикл по m до сходимости:
3. Вычисляем h_{im} , $i = \max(1, m - k + 1) \dots m$ и v_{m+1} по алгоритму Арнольди.
4. Обновляем LU разложение для H_m , получаем новый столбец U_m . Если $u_{mm} = 0$, завершаем алгоритм.
5. $\zeta = \beta$ для $m = 1$, потом $\zeta = -l_{m,m-1}\zeta_{m-1}$.
6. $p_m = u_{mm}^{-1}(u_m - \sum_{i=m-k+1}^{m-1} u_{im}p_i)$.
7. $x_m = x_{m-1} + \zeta_m p_m$.

При выходе на шаге 4 результат не точен. Нужно использовать LU с перестановкой строк.