1 Metoda konjugiranih gradientov s predpogojevanjem

Avtor: Luka Bajić

1.1 Opis problema

Metoda konjugiranih gradientov je postopek za reševanje linearnega sistema enačb $Ax = b$, ob predpostavki, da je matrika A pozitivno definitna. V našem primeru se ukvarjamo z razpršenimi matrikami, torej matrikami, ki imajo večino elementov ničelnih. Da izboljšamo hitrost konvergence metode konjugiranih gradientov, uporabimo predpogojevanje z matriko $M = LL^T$, kjer spodnjetrikotno matriko L dobimo z nepopolnim razcepom Choleskega.

Ker imamo opravka z razpršenimi matrikami, je s stališča prostorske zahtevnosti smiselno, da jih hranimo v posebni strukturi, ki hrani samo neničelne elemente in sestoji iz treh vektorjev: vektor vrednosti v matriki, vektor indeksov po vrsticah in vektor indeksov po stolpcih. Na primer za sledečo matriko:

$$A = \begin{bmatrix} 7 & 1.1 & 0 & 0 & 0 \\ 1.1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 4.2 \end{bmatrix}$$

hranimo vektorje

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & 3 & 4 & 5 & 5 \end{bmatrix}$$
$$J = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 & 3 & 5 & 4 & 3 & 5 \end{bmatrix}$$
$$V = \begin{bmatrix} 7 & 1.1 & 1.1 & 2 & 3 & 3 & 0.5 & 3 & 4.2 \end{bmatrix}$$

Uporabnost tega pristopa postane bolj očitna pri bistveno večjih matrikah in če je število ničelnih elementov dovolj veliko.

1.2 Opis rešitve

Implementacija ponuja tri metode: *nep_chol*, ki izračuna nepopolni razcep Choleskega za podano matriko A, *conj_grad_baseline*, ki izvede metodo konjugiranih gradientov nad podano matriko A in vektorjem desnih strani b in vrne iskan x, in *conj_grad*, ki prav tako vrne x, le da metodo konjugiranih gradientov izvede s predpogojevanjem s podano spodnjetrikotno matriko L.

1.2.1 Nepopolni razcep Choleskega

Razcep Choleskega je razcep $A = LL^T$, kjer je L spodnjetrikotna matrika, A pa je pozitivno definitna. Ideja nepopolnega razcepa Choleskega je, da za razpršene matrike najdemo približek razcepa, tako, da enostavno ignoriramo ničelne elemente.

Ker algoritem izkorišča podatkovno strukturo za razpršene matrike, in imamo opravka samo s simetričnimi matrikami, je smiselno najprej nastaviti vse zgornjetrikotne elemente na 0, saj s tem pohitrimo iteriranje po strukturi znotraj iteracij algoritma. Ta korak zahteva n operacij, vendar razpolovi količino elementov v matriki.

Nato iteriramo čez matriko A in posodabljamo diagonalne elemente s sledečo formulo:

$$L_{i,i} = \sqrt{A_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{i,k}^2}$$

kjer i teče po dimenzijah matrike A. Hkrati pa posodabljamo še poddiagonalne elemente na sledeč način:

$$L_{j,i} = \frac{A_{j,i} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{i,k} L_{j,k}}{L_{i,i}}$$

1.2.2 Metoda konjugiranih gradientov brez predpogojevanja

Iščemo rešitev sistema $Ax = b$, kjer je matrika A simetrična in pozitivno definitna. Za začetni približek x_0 vzamemo kar ničelni vektor in izračunamo $r_0 = b - Ax_0$. Nastavimo še $p_0 = x_0$ in nato ponavljamo sledečo iteracijo:

$$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$$

$$\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

Postopek zaključimo kadar je norma vektorja r_{k+1} manjša od želene tolerance.

1.2.3 Metoda konjugiranih gradientov s predpogojevanjem

Predpogojevanje izvajamo z matriko $M = LL^T$, kjer spodnjetrikotno matriko L dobimo z nepopolnim razcepom Choleskega. Rešiti moramo sistem $Mz = r$, vendar ker nočemo računati inverza M^{-1} (iz vidika časovne zahtevnosti), lahko najprej s premo substitucijo rešimo sistem $La = r$ in nato z obratno substitucijo rešimo sistem $L^T z = a$. Tako prema kot obratna substitucija imata časovno zahtevnost $O(n^2)$, kar je bistveno hitrejše od računanja inverza.

Zgornji postopek moramo ponoviti v vsakem koraku iteracije, in sicer na sledeč način: najprej kot začetno vrednost p_0 nastavimo rešitev sistema $Mz_0 = r_0$, korake pa izvajamo na sledeč način:

$$\alpha_k = \frac{r_k^T z_k}{p_k^T A p_k}$$

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$$

Rešimo sistem $Mz_{k+1} = r_{k+1}$.

$$\beta_k = \frac{r_{k+1}^T z_{k+1}}{r_k^T z_k}$$

$$p_{k+1} = z_{k+1} + \beta_k p_k$$

Zaustavitveni pogoj ostane enak kot pri osnovni metodi.

1.3 Primer uporabe

Spodnji izsek kode demonstrira razliko med metodo konjugiranih gradientov brez predpogojevanja in s predpogojevanjem.

```
using MKG, Plots, LinearAlgebra, SparseArrays

I = [1., 1, 2, 2, 3, 3, 4, 5, 5]
J = [1., 2, 1, 2, 3, 5, 4, 3, 5]
V = [7., 1.1, 1.1, 2, 3, 3, 0.5, 3, 4.2]
A = sparse(I, J, V)
b = [2, 3, -5, 1, 0.2]
L = nep_chol(A)
x1, it1, res1 = conj_grad_baseline(A, b, vrniresid=true)
x2, it2, res2 = conj_grad(A, b, L, vrniresid=true)

println("MKG brez predpogojevanja se zaustavi po $it1 korakih.")
println("MKG s predpogojevanjem se zaustavi po $it2 korakih.")
```

```
MKG brez predpogojevanja se zaustavi po 5 korakih.
MKG s predpogojevanjem se zaustavi po 1 korakih.
```

Kot vidimo že na relativno majhnem primeru, predpogojevanje bistveno izboljša konvergenco.

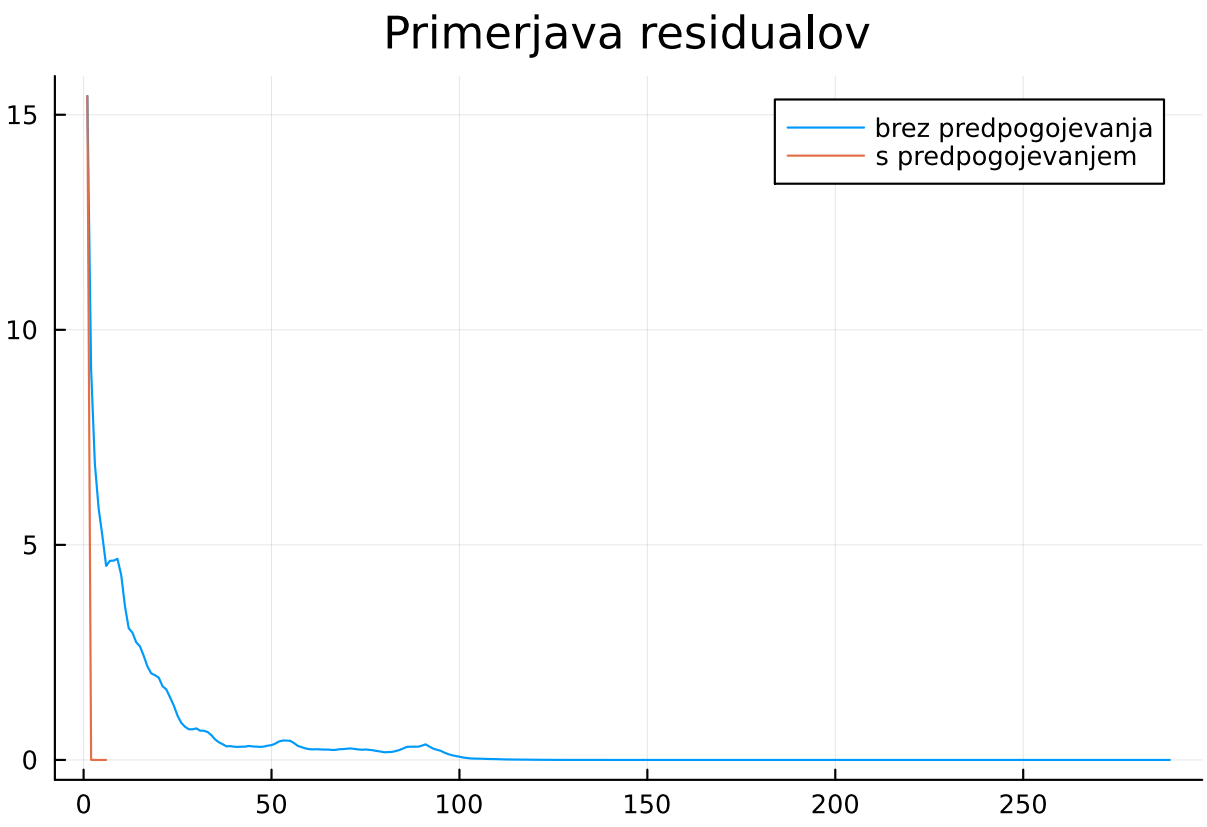
V spodnjem izseku si ogledamo še primer z bistveno večjo matriko, ki jo zgeneriramo psevdonaključno: za vse diagonalne elemente zgeneriramo naključna števila iz nekega intervala, za preostale elemente pa z neko manjšo verjetnostjo (npr. 0.1) zgeneriramo manjša števila, da ohranimo dominantnost diagonale. Vsako izmed teh števil zapišemo tako na indeks (i, j) kot (j, i), da ohranimo simetričnost. Ta postopek sicer ne zagotavlja pozitivne definitnosti zgenerirane matrike, vendar se empirično izkaže kot dovolj dober za potrebe te demonstracije.

Z zastavico *vrniresid* nam metodi vrneta tabelo residualov (oziroma neskončnih norm vektorjev r_{k+1}) na posameznem koraku iteracije. Residuale izrišemo s paketom Plots in tako dobimo vizualno primerjavo hitrosti konvergence med metodama.

```
n=700
I = [1.0]
J = [1.0]
V = [rand()*10.0]
for i=2:n
    push!(V, rand()*80.0)
    push!(I, i)
    push!(J, i)

    if rand() < 0.1
        r = rand()
        push!(V, r)
        push!(V, r)
        r1 = rand(1:n)
        r2 = rand(1:n)
        while r1==i || r2==i # poskrbimo, da ne prepišemo diagonale
            r1 = rand(1:n)
            r2 = rand(1:n)
        end
        push!(I, r1)
        push!(J, r2)
        push!(I, r2)
        push!(J, r1)
    end
end
A = sparse(I, J, V)
b = rand(n)
x1, it1, res1 = conj_grad_baseline(A, b, vrniresid=true, tol=10e-20)
L = nep_chol(A)
x2, it2, res2 = conj_grad(A, b, L, vrniresid=true, tol=10e-20)

plot(res1, label="brez predpogojevanja", title="Primerjava residualov")
plot!(res2, label="s predpogojevanjem", title="Primerjava residualov")
```


Primerjava residualov
brez predpogojevanja
s predpogojevanjem
15
10
5
0
0
50
100
150
200
250