9 Метод Крылова

9.1 Мотивация

Пусть $b \in \mathbb{R}^n$ и A - квадратная $n \times n$-матрица системы $Ax = b$. Представим матрицу A в следующем виде:

$$A = I - (I - A) \quad \Rightarrow \quad x = b + (I - A)x \quad \Rightarrow \quad x_{j+1} = x_j + (b - Ax_j) = x_j + r_j. \tag{1}$$

Отсюда следует, что

$$x_j = x_0 + r_1 + r_2 + \ldots + r_{j-1}.$$

С другой стороны, умножая обе части (1) на $-A$ и прибавляя b, получим:

$$b - Ax_{j+1} = b - Ax_j - Ar_j = r_j - Ar_j \quad \Rightarrow \quad r_j = (I - A)^j r_0.$$

Подстановка в исходное выражение дает:

$$x_j = x_0 + \left[\sum_{k=1}^{j-1} (I - A)^k\right] r_0 \quad \Rightarrow \quad \delta_x \in \mathcal{K}_j(r_0, A) := \langle r_0, Ar_0, A^2 r_0, \ldots, A^{j-1} r_0 \rangle_{\mathbb{R}}.$$

9.2 Подпространства Крылова

Пусть $v \in \mathbb{R}^n$ и A - квадратная $n \times n$-матрица.

Df. 1. Подпространством Крылова размерности m, порожденным вектором v и матрицей A называется линейное пространство

$$\mathcal{K}_m(v, A) = \langle v, Av, \ldots, A^{m-1} v \rangle_{\mathbb{R}}.$$

Lm. 1. *Пусть* $p_A(t)$ *- минимальный аннулирующий полином матрицы* A *в пространстве* $\langle v \rangle_{\mathbb{R}}$ *и* $\deg p(t) = \mu$, *тогда:*

1. $\forall m \leqslant \mu \quad \dim \mathcal{K}_m(v, A) = m$;

2. $\forall m \geqslant \mu \quad \mathcal{K}_m(v, A) = \mathcal{K}_\mu(v, A)$.

Lm. 2. *В пространстве* $\mathcal{K}_m(v, A)$ *существует ортонормированный базис.*

Доказательство. Используем ортогонализацию Арнольди:

$$\widetilde{v}_{j+1} = Av_j - \sum_{i=1}^{j} h_{j+1,i} v_i, \quad v_{j+1} = \widetilde{v}_{j+1} / \|v_{j+1}\|, \quad v_1 = v / \|v\|.$$

Условие ортогональности приводит к следующему выражению для коэффициентов $\alpha_{j,k}$:

$$\langle Av_j, v_k \rangle = \sum_{i=1}^{j} h_{j+1,i} \langle v_i, v_k \rangle \quad \Rightarrow \quad h_{j+1,k} = a_{j,k}.$$

$\square$

9.3 Биортогонализация Ланцоша

Df. 2. Системы линейно-независимых векторов $\{x_i\}_{i=1}^m$ и $\{y_j\}_{j=1}^m$ называются **биортогональными**, если $\langle x_i, y_i\rangle \neq 0$ и $\langle x_i, y_{j\neq i}\rangle = 0$.

Lm. 3. *Пусть вектоторы v_1 и w_1 таковы, что $\langle v_1, w_1\rangle \neq 0$. Тогда системы $\{v_i\}_{i=1}^m$ и $\{w_j\}_{j=1}^m$, определяемые следующим образом:*

$$v_{i+1} = Av_i - \alpha_i v_i - \beta_i v_{i=1}, \quad \alpha_i = \frac{\langle Av_i, w_i\rangle}{\langle v_i, w_i\rangle}, \quad v_0 = 0;$$
$$w_{i+1} = A^T w_i - \alpha_i w_i - \beta_i w_{i-1}, \quad \beta_i = \frac{\langle v_i, w_i\rangle}{\langle v_{i-1}, w_{i-1}\rangle}, \quad w_0 = 0,$$

являются биортогональными и образуют базисы пространств $\mathcal{K}_m(v_1, A)$ и $\mathcal{K}_m(w_1, A^T)$ соответственно.

Доказательство. Докажем биортогональность наборов $\{v_i\}_{i=1}^m$ и $\{w_i\}_{i=1}^m$ методом индукции: выберем $\langle v_1, w_2\rangle \neq 0$ и $\langle v_0, w_i\rangle = 0$ в качестве базы. Далее:

$$\langle v_{i+1}, w_j\rangle = \langle Av_i, w_j\rangle - \alpha_i\langle v_i, w_j\rangle - \beta_i\langle v_{i-1}, w_j\rangle.$$

Если $j = i$, тогда по предположению $\langle v_{i-1}, w_i\rangle = 0$ и

$$\langle v_{i+1}, w_i\rangle == \langle Av_i, w_i\rangle - \alpha\langle v_i, w_i\rangle = \langle Av_i, w_i\rangle - \frac{\langle Av_i, w_i\rangle}{\langle v_i, w_i\rangle}\cdot\langle v_i, w_i\rangle = 0.$$

Пусть теперь $j < i$, тогда

$$\langle v_{i+1}, w_j\rangle = \langle v_i, A^T w_j\rangle - \beta_i\langle v_{i-1}, w_j\rangle =$$
$$\langle v_i, w_{j+1} + \alpha_j w_j + \beta_j w_{j-1}\rangle - \beta_i\langle v_{i-1}, w_j\rangle =$$
$$\langle v_i, w_{j+1}\rangle + \alpha_j\langle v_i, w_j\rangle + \beta_j\langle v_i, w_{j-1}\rangle - \beta_i\langle v_{i-1}, w_j\rangle.$$

Если $j < i - 1$то по предположению все четыре скалярных произведения обращаются в нуль. Если же $j = i - 1$, тогда имеем

$$\langle v_{i+1}, w_{i-1}\rangle = \langle v_i, w_i\rangle - \beta_i\langle v_{i-1}, w_{i-1}\rangle = \langle v_i, w_i\rangle - \frac{\langle v_i, w_i\rangle}{\langle v_{i-1}, w_{i-1}\rangle}\langle v_{i-1}, w_{i-1}\rangle = 0.$$

Случай $\langle v_j, w_{i+1}\rangle = 0$ для $j < i$ доказывается аналогично. Чтобы доказать полноту и линейную независимсоть систем $\{v_i\}_{i=1}^m$ и $\{w_j\}_{j=1}^m$, заметим сначала, что $span(x_1 \dots x_m) = \mathcal{K}_m(v_1, A)$. Далее, рассмотрим линейную комбинацию:

$$\sum_{i=1}^m \alpha^i v_i = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=1}^m \alpha^i\langle v_i, w_j\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha^j = 0.$$

И, значит, набор $\{v_i\}_{i=1}^m$ является линейно независимым. Аналогично доказывается линеяная неависимость набора $\{w_j\}_{j=1}^m$. □

9.4 Методы крыловского типа

9.4.1 FOM: метод полной ортогонализации

Итерация метода полной ортогонализации (FOM) порядка m определяется как вектор

$$x_m = x_0 + V_m y_m,$$

для которого соответствующий остаток

$$r_m = b - Ax_m$$

ортогонален крыловскому подпространству:

$$r_m \perp \mathcal{K}_m(A, r_0) \Longrightarrow V_m^\top r_m = 0.$$

Th. 9.1 (Условие Галёркина и малая система для FOM). *Пусть $x_m = x_0 + V_m y_m$ — итерация FOM порядка m, а $r_m = b - Ax_m$ — остаток. Тогда вектор коэффициентов $y_m \in \mathbb{R}^m$ единственным образом определяется из системы*

$$G_m y_m = g_m, \quad G_m = V_m^\top A V_m, \qquad g_m = V_m^\top r_0.$$

При невырожденности матрицы G_m решение y_m существует и единственно, а условие Галёркина

$$V_m^\top r_m = 0$$

эквивалентно этой малой системе.

Доказательство. Подставим представление

$$x_m = x_0 + V_m y_m$$

в выражение для остатка:

$$r_m = b - Ax_m = b - A(x_0 + V_m y_m) = (b - Ax_0) - AV_m y_m = r_0 - AV_m y_m.$$

Условие Галёркина $V_m^\top r_m = 0$ даёт $V_m^\top (r_0 - AV_m y_m) = 0$, то есть

$$V_m^\top r_0 - V_m^\top A V_m y_m = 0.$$

Обозначая $G_m = V_m^\top A V_m$ и $g_m = V_m^\top r_0$, получаем $G_m y_m = g_m$. Если G_m невырождена, то решение y_m единственно, а значит, единственен и x_m. □

Nb. 1. Обратное тоже верно: всякое решение малой системы порождает x_m, удовлетворяющий условию Галёркина.

9.4.2 GMRES: метод обобщенных минимальных невязок

Df. 3. Итерация метода GMRES порядка m определяется как вектор

$$x_m = x_0 + V_m y_m,$$

где $y_m \in \mathbb{R}^m$ выбирается по критерию минимизации нормы невязки

$$y_m = \arg\min_{y \in \mathbb{R}^m} \|b - A(x_0 + V_m y)\|_2.$$

Соответствующий остаток

$$r_m = b - Ax_m$$

обладает минимальной евклидовой нормой среди всех остатков в подпространстве $x_0 + \mathcal{K}_m(A, r_0)$.

Th. 9.2 (Условие Петро–Галёркина для GMRES). *Для итерации* $x_m = x_0 + V_m y_m$ *метода GMRES и остатка* $r_m = b - Ax_m$ *выполняется*

$$r_m \perp A\,\mathcal{K}_m(A, r_0),$$

то есть

$$(AV_m)^\top r_m = 0.$$

Доказательство. Рассмотрим функцию

$$\varphi(y) = \|b - A(x_0 + V_m y)\|_2^2 = \|r_0 - AV_m y\|_2^2.$$

Вектор y_m — точка минимума φ, поэтому градиент по y обнуляется:

$$\nabla_y \varphi(y_m) = -2(AV_m)^\top (r_0 - AV_m y_m) = 0.$$

Так как $r_m = r_0 - AV_m y_m$, получаем

$$(AV_m)^\top r_m = 0,$$

то есть r_m ортогонален линейной оболочке столбцов AV_m, то есть подпространству $A\,\mathcal{K}_m(A, r_0)$. □

9.4.3 BCG: метод бисопряженных градиентов

Выберем теневой остаток $\widetilde{r_0} \in \mathbb{R}^n$ так, что

$$(\widetilde{r_0}, r_0) \neq 0,$$

где $(\cdot, \cdot)$ — стандартное скалярное произведение.

Выберем базисы $\{v_1, \ldots, v_m\}$ и $\{\widetilde{v_1}, \ldots, \widetilde{v_m}\}$ подпространств $\mathcal{K}_m(A, r_0)$ и $\mathcal{K}_m(A^\top, \widetilde{r_0})$ так, чтобы они были биортогональны.

Df. 4. Итерация метода бисопряжённых градиентов (BiCG) порядка m определяется как вектор

$$x_m \in x_0 + \mathcal{K}_m(A, r_0),$$

для которого остаток

$$r_m = b - Ax_m$$

ортогонален двойственному крыловскому подпространству:

$$r_m \perp \mathcal{K}_m(A^\top, \widetilde{r}_0) \Longrightarrow \widetilde{V}_m^\top r_m = 0.$$

Th. 9.3 (Рекуррентная форма BCG). *Пусть заданы x_0, $r_0 = b - Ax_0$, $\widetilde{r}_0$ с $(\widetilde{r}_0, r_0) \neq 0$. Определим последовательности*

$$p_0 = r_0, \qquad \widetilde{p}_0 = \widetilde{r}_0,$$

а для $k = 0, 1, \dots$ рекуррентно

$$\alpha_k = \frac{(\widetilde{r}_k, r_k)}{(\widetilde{p}_k, Ap_k)},$$
$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k,$$
$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k, \qquad \widetilde{r}_{k+1} = \widetilde{r}_k - \alpha_k A^\top \widetilde{p}_k,$$
$$\beta_k = \frac{(\widetilde{r}_{k+1}, r_{k+1})}{(\widetilde{r}_k, r_k)},$$
$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k, \qquad \widetilde{p}_{k+1} = \widetilde{r}_{k+1} + \beta_k \widetilde{p}_k,$$

пока все знаменатели отличны от нуля. Тогда для каждого m:

- $x_m \in x_0 + \mathcal{K}_m(A, r_0)$, $\widetilde{r}_m \in \mathcal{K}_m(A^\top, \widetilde{r}_0)$;
- *выполняется биортогональность остатков:*

  $$(\widetilde{r}_i, r_j) = 0 \quad \textit{при } i \neq j;$$

- *выполняется ортогональность по A направлений поиска:*

  $$(\widetilde{p}_i, Ap_j) = 0 \quad \textit{при } i \neq j;$$

- *вектор x_m удовлетворяет петро–галёркинскому условию*

  $$\widetilde{V}_m^\top (b - Ax_m) = 0$$

  для некоторого базиса $\widetilde{V}_m$ пространства $\mathcal{K}_m(A^\top, \widetilde{r}_0)$.

Доказательство. Доказательство проводится по индукции по k и основано на прямой подстановке рекуррентных формул в скалярные произведения $(\widetilde{r}_i, r_j)$ и $(\widetilde{p}_i, Ap_j)$ и использовании определений α_k, β_k. На каждом шаге новые остатки и направления выражаются как линейные комбинации предыдущих, что сохраняет принадлежность крыловским подпространствам. Подробные выкладки стандартны для BCG и опускаются. □

9.4.4 CG: метод сопряженных градиентов

Пусть $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ — симметричная положительно определённая матрица, $b \in \mathbb{R}^n$. С задачей $Ax = b$ естественно связан квадратичный функционал энергии

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x),$$

минимум которого достигается в решении системы $Ax = b$.

Df. 5. Итерация метода сопряжённых градиентов порядка m определяется как вектор

$$x_m \in x_0 + \mathcal{K}_m(A, r_0),$$

для которого выполняется *условие Галёркина*

$$r_m = b - Ax_m \;\perp\; \mathcal{K}_m(A, r_0),$$

то есть

$$(r_m, v) = 0 \quad \forall v \in \mathcal{K}_m(A, r_0).$$

Эквивалентно, метод CG ищет x_m в аффинном подпространстве $x_0 + \mathcal{K}_m(A, r_0)$ так, чтобы остаток был ортогонален этому подпространству.

Th. 9.4 (Эквивалентные характеристики итерации CG). *Для симметричной положительно определённой матрицы A и любого $m \geqslant 1$ следующие свойства вектора x_m эквивалентны:*

1. $x_m \in x_0 + \mathcal{K}_m(A, r_0)$ *и остаток удовлетворяет условию Галёркина*

$$r_m \perp \mathcal{K}_m(A, r_0);$$

2. *ошибка $e_m = x_* - x_m$ минимальна в A-норме на $x_0 + \mathcal{K}_m(A, r_0)$:*

$$\|e_m\|_A = \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}_m(A, r_0)} \|x_* - x\|_A;$$

3. *существуют направления поиска $p_0, \dots, p_{m-1}$ такие, что*

$$x_m = x_0 + \sum_{k=0}^{m-1} \alpha_k p_k,$$

$$p_k \in \mathcal{K}_{k+1}(A, r_0), \quad (p_i, p_j)_A = 0 \text{ при } i \neq j,$$

и на каждом шаге выполняется

$$r_{k+1} \perp p_0, \dots, p_k.$$

Идея доказательства. Условие Галёркина эквивалентно тому, что градиент $\nabla\varphi(x_m) = -r_m$ ортогонален всем допустимым приращениям $x - x_m$ из подпространства $\mathcal{K}_m(A, r_0)$, то есть x_m является точкой минимума φ на $x_0 + \mathcal{K}_m(A, r_0)$, что даёт (2). Оптимальность в A-норме следует из эквивалентности $\varphi(x) - \varphi(x_*) = \frac{1}{2}\|x - x_*\|_A^2$. Рекуррентная форма CG подбирает направления p_k, которые одновременно лежат в крыловском подпространстве и являются A-сопряжёнными, что приводит к (3). Обратное рассуждение строится по тем же шагам. □

Nb. 2. На практике метод сопряжённых градиентов реализуется в виде короткого (трёхчленного) рекуррентного алгоритма по остаткам и направлениям, но концептуально остаётся *крыловским методом*, минимизирующим квадратичный функционал на $\mathcal{K}_m(A, r_0)$.