

CG, Lanczos a Gaussova kvadratura

Formulace problému

Uvažujme systém

$$Ax = b$$

kde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je **symetrická, pozitivně definitní**.

- A je velká a řídká ,
- nepotřebujeme znát přesné řešení ,
- jsme schopni realizovat Av (v je vektor) .

Bez újmy na obecnosti, $\|b\| = 1$, $x_0 = 0$.

Metoda sdružených gradientů

input A, b

$r_0 = b, p_0 = r_0$

for $k = 1, 2, \dots$ **do**

$$\gamma_{k-1} = \frac{r_{k-1}^T r_{k-1}}{p_{k-1}^T A p_{k-1}}$$

$$x_k = x_{k-1} + \gamma_{k-1} p_{k-1}$$

$$r_k = r_{k-1} - \gamma_{k-1} A p_{k-1}$$

$$\delta_k = \frac{r_k^T r_k}{r_{k-1}^T r_{k-1}}$$

$$p_k = r_k + \delta_k p_{k-1}$$

test kvality x_k

end for

Matematické vlastnosti CG

optimální vlastnost

ktý **Krylovův podprostor**,

$$\mathcal{K}_k(A, b) \equiv \text{span}\{b, Ab, \dots, A^{k-1}b\}.$$

CG $\rightarrow x_k, r_k, p_k$

- rezidua $r_0, \dots, r_{k-1}$ tvoří **ortogonální** bázi $\mathcal{K}_k(A, b)$,
- vektory $p_0, \dots, p_{k-1}$ tvoří **A-ortogonální** bázi $\mathcal{K}_k(A, b)$,
- CG nalezne řešení $Ax = b$ nejvýše po n krocích.
- Aproximace řešení x_k **je optimální**

$$\|x - x_k\|_A = \min_{y \in \mathcal{K}_k} \|x - y\|_A.$$

Lanczosův algoritmus

A je symetrická, výpočet ortonormální báze $\mathcal{K}_k(A, b)$

input A, b

$v_1 = b/\|b\|, \delta_1 = 0$

$\beta_0 = 0, v_0 = 0$

for $k = 1, 2, \dots$ **do**

$\alpha_k = v_k^T A v_k$

$w = A v_k - \alpha_k v_k - \beta_{k-1} v_{k-1}$

$\beta_k = \|w\|$

$v_{k+1} = w/\beta_k$

end for

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \beta_{k-1} \\ & & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix}$$

$$A v_k = \beta_k v_{k+1} + \alpha_k v_k + \beta_{k-1} v_{k-1}.$$

Lanczosův algoritmus lze reprezentovat vztahem

$$A V_k = V_k T_k + \beta_k v_{k+1} e_k^T, \quad V_k^* V_k = I.$$

CG versus Lanczos

Nechť A je symetrická, pozitivně definitní

CG aproximace x_k je dána **vztahem** 

$$x_k = V_k y_k \quad \text{kde} \quad T_k y_k = \|b\| e_1,$$

a

$$v_{k+1} = (-1)^k \frac{r_k}{\|r_k\|}.$$

CG generuje LDL^T **rozklad** matice $T_k = L_k D_k L_k^T$ kde 

$$L_k \equiv \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \sqrt{\delta_1} & \ddots & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \sqrt{\delta_{k-1}} & 1 \end{bmatrix}, \quad D_k \equiv \begin{bmatrix} \gamma_0^{-1} & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \gamma_{k-1}^{-1} \end{bmatrix}.$$

CG versus Lanczos

Shrnutí

- Oba algoritmy generují ortogonální bázi Krylova podprostoru $\mathcal{K}_k(A, b)$.
- Lanczos generuje ortonormální bázi $v_1, \dots, v_k$ pomocí **tříčlenné rekurence** $\rightarrow \mathbf{T}_k$.
- CG generuje ortogonální bázi $r_0, \dots, r_{k-1}$ pomocí **zdvojené dvoučlenné rekurence** $\rightarrow LDL^T$ rozklad $\mathbf{T}_k$.
- Platí

$$v_{k+1} = (-1)^k \frac{r_k}{\|r_k\|}.$$

Ortogonalní vektory $\rightarrow$ ortogonální polynomy

- rezidua $r_0, \dots, r_{k-1}$ tvoří **ortogonální bázi** $\mathcal{K}_k(A, b)$,
- “CG je **polynomiální metoda**”,

$$v \in \mathcal{K}_k(A, b) \Rightarrow v = \sum_{j=0}^{k-1} \zeta_j A^j b = q(A)b$$

kde q je polynom stupně nejvýše $k - 1$.

- **Notace:** $r_k = q_k(A)b$, $A = U\Lambda U^T$, $b = U\omega$. Pro $i \neq j$

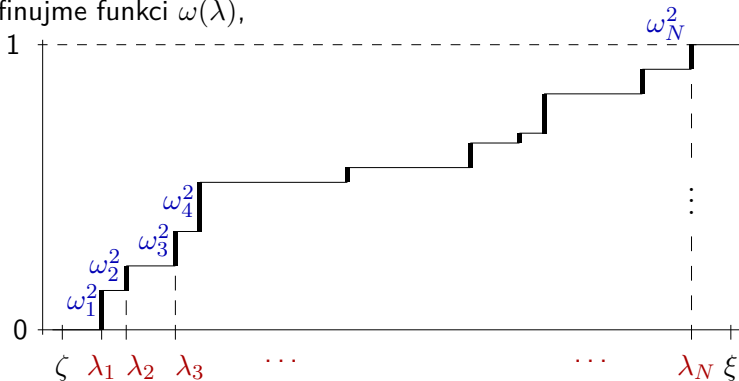
$$\begin{aligned} 0 &= r_i^T r_j = b^T q_i(A) q_j(A) b = \omega^T q_i(\Lambda) q_j(\Lambda) \omega \\ &= \sum_{\ell=1}^N \omega_\ell^2 q_i(\lambda_\ell) q_j(\lambda_\ell) \equiv \langle q_i, q_j \rangle_{\omega, \Lambda}. \end{aligned}$$

- CG (implicitně) konstruuje **posloupnost ortogonálních polynomů**.

Distribuční funkce (míra) $\omega(\lambda)$

$$A, b \rightarrow \langle \cdot, \cdot \rangle_{\omega, \Lambda} : \quad \langle f, g \rangle_{\omega, \Lambda} = \sum_{\ell=1}^N \omega_{\ell}^2 f(\lambda_{\ell}) g(\lambda_{\ell}).$$

Definujme funkci $\omega(\lambda)$,



Potom,

$$\langle f, g \rangle_{\omega, \Lambda} = \int_{\zeta}^{\xi} f(\lambda) g(\lambda) d\omega(\lambda).$$

Ortogonalní polynomy a Gaussova kvadratura

obecná teorie

Kvadrurní vzorec

$$\int_{\zeta}^{\xi} f(\lambda) d\omega(\lambda) = \sum_{i=1}^k w_i f(\nu_i) + \mathcal{R}_k[f].$$

Gaussův kvadrurní vzorec:

- Maximální algebraická přesnost $2k - 1$
- **Uzly a váhy** mohou být počítány pomocí **ortogonalních polynomů** (například ν_i jsou jejich kořeny).
- Ortogonalní polynomy mohou být generovány tříčlennou rekurencí. Koeficienty $\rightarrow$ **Jacobiho matice**.
- Uzly a váhy Gaussova kvadrurního vzorce mohou být počítány ze znalosti Jacobiho matice.

CG, Lanczos a Gaussova kvadratura

K každém iteračním kroku k , CG (implicitně) určuje **uzly** a **váhy** k -bodové Gaussovy kvadratury

$$\int_{\zeta}^{\xi} f(\lambda) d\omega(\lambda) = \sum_{i=1}^n \omega_i^{(k)} f(\theta_i^{(k)}) + \mathcal{R}_k[f].$$

T_k ... Jacobiho matice, $\theta_i^{(k)}$... vlastní čísla T_k , $\omega_i^{(k)}$... kvadráty první složek normalizovaných vlastních vektorů T_k .

$f(\lambda) \equiv \lambda^{-1}$. Kvadratura pomocí **Lanczose**:

$$\left(T_n^{-1}\right)_{1,1} = \left(T_k^{-1}\right)_{1,1} + \mathcal{R}_k[\lambda^{-1}].$$

Kvadratura pomocí **CG**

$$\|x\|_A^2 = \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j \|r_j\|^2 + \|x - x_k\|_A^2.$$

CG, Lanczos, kvadratura

Shrnutí

Souvislosti

- CG, Lanczos,
- Ortogonální polynomy, Jacobiho matrice,
- Gaussova kvadratura, uzly a váhy.

Užitečné při

- **odhadování norem chyb** v CG,
- **pochopení chování** CG a Lanczose v konečné aritmetice.