9 Метод на спрегнатия градиент с преобуславяне.

9.1 Формулировка на метода. Непряк и пряк PCG алгоритъм.

Основната идея на метода на спрегнатия градиент с преобуславяне (Preconditioned Conjugate Gradient (PCG) method) е да се модифицира изходната система от линейни алгебрични уравнения по такъв начин, че числото на обусловеност на новата задача да бъде съществено намалено. По-точна формулировка на стратегията на преобуславяне ще дадем в края на тази лекция.

Нека E е произволна неособена матрица. В системата

$$H\hat{x} = b$$

полагаме

$$\hat{y} = E\hat{x}$$

и получаваме еквивалентната система

$$HE^{-1}\hat{y} = b.$$

Симетризираме новата система и получаваме модификация на изходната задача във вида

$$\tilde{H}\hat{y} = \tilde{b}, \tag{9.1}$$

където

$$\tilde{H} = {E^{-1}}^T H E^{-1}, \qquad \tilde{b} = {E^{-1}}^T b.$$

Решаването на (9.1) е еквивалентно на минимизиране на функционала

$$\tilde{f}(y) = y^T \tilde{H} y - 2\tilde{b}^T y + C.$$

Прякото прилагане на метода на спрегнатия градиент за решаване на тази задача води до вариант на метода на спрегнатия градиент с преобуславяне, известен като алгоритъм PCG - A.

АЛГОРИТЪМ PCG - A

$$y^0, \quad \tilde{g}^0 = \tilde{H}y^0 - \tilde{b}, \quad \tilde{d}^0 = -\tilde{g}^0,$$

$$k = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\tau_k = \frac{(\tilde{g}^k)^T \tilde{g}^k}{(\tilde{d}^k)^T \tilde{H} \tilde{d}^k}$$

$$y^{k+1} = y^k + \tau_k \tilde{d}^k$$

$$\tilde{g}^{k+1} = \tilde{g}^k + \tau_k \tilde{H} \tilde{d}^k$$

$$\beta_k = \frac{(\tilde{g}^{k+1})^T \tilde{g}^{k+1}}{(\tilde{g}^k)^T \tilde{g}^k}$$

$$\tilde{d}^{k+1} = -\tilde{g}^{k+1} + \beta_k \tilde{d}^k$$

В тази формулировка, на всяка стъпка от итерационния процес се пресмята произведение от вида $\tilde{H}\tilde{d}^k = {E^{-1}}^t H E^{-1} \tilde{d}^k$, което по същество означава решаване на две системи с матрицата E. Освен това, необходими са още следните помощни пресмятания: $\tilde{b} = {E^{-1}}^t b$ и $x = E^{-1}y$. Алгоритъм PCG A е известен като непряк метод на спрегнатия градиент с преобуславяне. В изчислителната практика по-често се прилага прекия метод, където на всяка стъпка от итерационния процес получаваме директно приближение на търсеното решение от редицата $x^k \to \hat{x}$.

Прекият метод на спрегнатия градиент с преобуславяне се получава от алгоритъм PCG-A с помощта на еквивалентни преобразувания на всяка от изчислителните стъпки. Така, за връзката между g и $\tilde{g}$ получаваме

$$g = Hx - b$$

$$\tilde{g} = \tilde{H}y - \tilde{b} = {E^{-1}}^T H E^{-1} y - {E^{-1}}^T b = {E^{-1}}^T (Hx - b) = {E^{-1}}^T g$$

и следователно

$$\tilde{g} = E^{-1^T} g. \tag{9.2}$$

Нека предположим, че за последователните приближения е в сила зависимостта

$$x^{k+1} = x^k + \tau_k d^k.$$

Тогава

$$Ex^{k+1} = Ex^k + \tau_k E d^k$$

$$y^{k+1} = y^k + \tau_k E d^k$$

и следователно

$$\tilde{d}^k = Ed^k. \tag{9.3}$$

Полагаме

$$C = E^T E, \qquad h^k = C^{-1} g^k.$$

Така получаваме зависимостите:

$$\tau_k = \frac{(\tilde{g}^k)^T \tilde{g}^k}{(\tilde{d}^k)^T \tilde{H} \tilde{d}^k} = \frac{g^{k^T} E^{-1} E^{-1^T} g^k}{d^{k^T} E^T E^{-1^T} H E^{-1} E d^k}$$

и следователно

$$\tau_k = \frac{g^{k^T} h^k}{d^{k^T} H d^k}; \tag{9.4}$$

$$\beta_k = \frac{(\tilde{g}^{k+1})^T \tilde{g}^{k+1}}{(\tilde{g}^k)^T \tilde{g}^k}$$

и следователно

$$\beta_k = \frac{g^{k+1^T} h^{k+1}}{g^{k^T} h^k}; \tag{9.5}$$

$$\tilde{d}^{k+1} = -\tilde{g}^{k+1} + \beta_k \tilde{d}^k$$

$$Ed^{k+1} = -E^{-1^T} g^{k+1} + \beta E d^k$$

$$d^{k+1} = -E^{-1} E^{-1^T} g^{k+1} + \beta_k d^k$$

и следователно

$$d^{k+1} = -h^{k+1} + \beta_k d^k. \tag{9.6}$$

Заместваме в алгоритъм PCG-A (9.1-9.6) и получаваме прекия метод на спрегнатия градиент с преобуславяне.

<u>АЛГОРИТЪМ PCG - B</u>

$$x^0, \quad g^0 = Hx^0 - b, \quad h^0 = C^{-1}g^0, \quad d^0 = -h^0$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

$$\tau_k = \frac{{g^k}^T h^k}{{d^k}^T H d^k}$$

$$x^{k+1} = x^k + \tau_k d^k$$

$$g^{k+1} = g^k + \tau_k H d^k$$

$$h^{k+1} = C^{-1} g^{k+1}$$

$$\beta_k = \frac{(g^{k+1})^T h^{k+1}}{{g^k}^T h^k}$$

$$d^{k+1} = -h^{k+1} + \beta_k d^k$$

Важно е да отбележим, че алгоритъм PCG-B не използва никъде в явен вид матрицата E, а само симетричната и положително определена матрица $C = E^t E = E E^t$. Във всички следващи разглеждания, когато говорим за метод на спрегнатия градиент с преобуславяне, ще предполагаме че имаме предвид алгоритъм PCG-B

Дефиниция 9.1 *Симетричната и положително определена матрица C, участваща в алгоритъм PCG-B, се нарича преобуславяща матрица, или по-кратко преобусловител.*

Нека отбележим, че така описаният алгоритъм PCG-B на всяка стъпка от итерационния процес включва едно решаване на система с преобуславящата матрица C, едно умножение на матрицата H по вектор плюс две скаларни произведения и три векторни операции от типа умножение на скалар по вектор плюс вектор. Така за изчислителната сложност на една итерация получаваме оценката

$$\mathcal{N}_{it}^{PCG}(H^{-1}b) \approx \mathcal{N}(C^{-1}g) + \mathcal{N}(Hd) + 10N. \tag{9.7}$$

9.2 Сходимост. Стратегия на преобуславяне.

Оценка на грешката $(y^k - \hat{y})$ в термините на алгоритъм PCG-A и норма, породена от матрицата $\tilde{H}$, следва директно от оценката за CG метода. По-естествена обаче е оценка за скоростта на сходимост относно $||x^k - \hat{x}||_H$.

Теорема 9.1 *Достатъчно условие за получаване на относителна грешка в метода на спрегнатия градиент с преобуславяне, удовлетворяваща неравенството*

$$\frac{||x^k - \hat{x}||_H}{||x^0 - \hat{x}||_H} \le \epsilon$$

е

$$k \ge \frac{1}{2}\sqrt{\kappa(C^{-1}H)}\ln(2/\epsilon) + 1. \tag{9.8}$$

Доказателство. От определението на $\tilde{H} = E^{-1^t} H E^{-1}$ получаваме зависимостта

$$\begin{aligned} ||y^k - \hat{y}||_{\tilde{H}}^2 &= (y^k - \hat{y})^t \tilde{H} (y^k - \hat{y}) && (9.9) \\ &= (x^k - \hat{x})^t E^t E^{-1^t} H E^{-1} E (x^k - \hat{x}) && (9.10) \end{aligned}$$

и следователно

$$||y^k - \hat{y}||_{\tilde{H}} = ||x^k - \hat{x}||_H. \tag{9.11}$$

Също така лесно се проверява, че екстремалните собствени числа на $\tilde{H}$ и $C^{-1}H$ са равни. Действително

$$\begin{aligned}
\lambda_1(\tilde{H}) &= \min_x \frac{(\tilde{H}x,x)}{(x,x)} = \min_x \frac{(E^{-1^t}HE^{-1}x,x)}{(x,x)} \\
&= \min_x \frac{(HE^{-1}x,E^{-1}x)}{(x,x)} = \min_z \frac{(Hz,z)}{(Ez,Ez)} \\
&= \min_z \frac{(Hz,z)}{(E^tEz,z)} = \min_z \frac{(Hz,z)}{(Cz,z)}
\end{aligned}$$

и следователно

$$\lambda_1(\tilde{H}) = \lambda_1(C^{-1}H).$$

Аналогично

$$\begin{aligned}
\lambda_N(\tilde{H}) &= \max_x \frac{(\tilde{H}x,x)}{(x,x)} = \max_x \frac{(E^{-1^t}HE^{-1}x,x)}{(x,x)} \\
&= \max_x \frac{(HE^{-1}x,E^{-1}x)}{(x,x)} = \min_z \frac{(Hz,z)}{(Ez,Ez)} \\
&= \max_z \frac{(Hz,z)}{(E^tEz,z)} = \max_z \frac{(Hz,z)}{(Cz,z)}
\end{aligned}$$

и следователно

$$\lambda_N(\tilde{H}) = \lambda_N(C^{-1}H).$$

Така получаваме равенството

$$\kappa(\tilde{H}) = \kappa(C^{-1}H).$$

Доказателството следва пряко от Теорема 8.4, където заместваме (9.11) и последното равенство. ∎

От оценката за изчислителната сложност на метода на спрегнатия градиент с преобуславяне и от Теорема 9.1 следва общата стратегия за конструиране на ефективни преобусловители. Целта е матрицата C в PCG алгоритъма да удовлетворява следните две условия:

- Съществува ефективен алгоритъм за решаване на системи с преобусловителя C. Това означава, че за изчислителната сложност искаме да е в сила условието
$$\mathcal{N}(C^{-1}x) << \mathcal{N}(H^{-1}x).$$

- Относителното число на обусловеност е съществено по-малко от числото на обусловеност на изходната матрица, т.е.

$$\kappa(C^{-1}H) << \kappa(H).$$

Тези условия изглеждат на пръв поглед противоречиви. Действително, когато $\kappa(C^{-1}H)$ клони към минималната си стойност, C клони към H и $\mathcal{N}(C^{-1}x) \to \mathcal{N}(H^{-1}x)$. Тези разсъждения обаче са твърде песимистични на фона на съвременните постижения в областта на методите за преобуславяне.

Дефиниция 9.2 *Казваме, че преобусловителят C е оптимален, когато*

- $\mathcal{N}(C^{-1}x) = O(N)$
- $\kappa(C^{-1}H) = O(1)$

Основен въпрос в съвременната теория и изчислителна практика на итерационните методи е съществуването и алгоритмичната реализация на оптимални преобусловители за класове задачи.

9.3 Пример.

Нека е дадено уравнението

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f, \qquad (x, y) \in \Omega$$

в единичния квадрат $\Omega = (0,1)^2$ с хомогенни гранични условия на Дирихле $u_{|\partial\Omega} = 0$. За численото решаване на тази задача е приложен методът на крайните елементи, като за целта е използвана равномерна квадратна мрежа със стъпка $h = 1/(n+1)$ и триангулация $\mathcal{T}$, която е получена при разделяне на всяка от квадратните клетки на два еднакви равнобедрени триъгълника с помощта на съгласувани диагонали.

След дискретизацията на тази проста, но съдържателна задача, получаваме системата

$$A_\Delta \hat{x} = b,$$

където

$$A_\Delta = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & & & \\ A_{2,1} & A_{2,2} & A_{2,3} & & \\ & A_{3,2} & A_{3,3} & A_{3,4} & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & A_{n,n-1} & A_{n,n} \end{bmatrix},$$

$A_{i,j}$ са блокове с размерност $n \times n$,

$$A_{i,i} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & 4 & -1 & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix}, \qquad A_{i,i-1} = A_{i,i+1} = -I.$$

Размерността на A_Δ е $N = n^2$. Дълги години тази моделна задача се използва за проверка на ефективността на итерационните методи относно параметъра на дискретизация h. В сила е следната лема, която характеризира числото на обусловеност на матрицата на коравина A_Δ.

Лема 9.1 *За числото на обусловеност на матрицата на коравина от Пример 1 е в сила оценката*

$$\kappa(A_\Delta) = O(h^{-2}) = O(N). \tag{9.12}$$

Доказателство. Матрицата A_Δ може да се запише във вида

$$A_\Delta = T \otimes I + I \otimes T,$$

където с $\otimes$ е означено тензорното произведение, I и T са с размерност $n \times n$,

I е единичната матрица, а T има вида

$$T = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Собствените числа на T са известни. Те са решение на съответното елементарно хомогонно рекурентно уравнение с хомогенни гранични условия и имат вида

$$\lambda_k = 4 \sin^2 \frac{k\pi h}{2},$$

откъдето за екстремалните собствени числа на A_Δ получаваме

$$\lambda_{min}(A_\Delta) = 8 \sin^2 \frac{\pi h}{2},$$

$$\lambda_{max}(A_\Delta) = 8 \cos^2 \frac{\pi h}{2}$$

и следователно

$$\kappa(A_\Delta) = \left(\frac{\cos^2 \frac{\pi h}{2}}{\sin^2 \frac{\pi h}{2}} \right) = \frac{4h^{-2}}{\pi^2} \cos^2 \frac{\pi h}{2} \left(\frac{\left(\frac{\pi h}{2}\right)^2}{\sin^2 \frac{\pi h}{2}} \right),$$

откъдето пряко следва твърдението в лемата. ∎

Следствие 9.1 *От лемата получаваме, че броят на итерациите в метода на спрегнатия градиент за решаване на линейната система $A_\Delta \hat{x} = b$, е*

$$n_{it}^{CG}(A_\Delta) = O\left(\sqrt{\kappa(A_\Delta)}\right) = O\left(N^{1/2}\right)$$

и следователно общата изчислителна сложност на алгоритъма за решаване на системата е

$$\mathcal{N}^{CG}(A_\Delta^{-1} b) = O\left(N^{3/2}\right).$$

Нека припомним, че точно такава е асимптотичната сложност на метода на вложените сечения, което е най-добрият известен резултат за пряк метод.

В следващата таблица са представени резултати от числени експерименти за моделната задача от примера. Основна цел на тези експерименти е да илюстрират сходимостта на различни итерационни методи в зависимост от размерността на дискретната задача, където $n \in \{4, 8, 16, 32, 64\}$ съответства на процедура на равномерно двукратно сгъстяване на мрежата по всяко едно от координатните направления. В таблицата са показани итерациите, които са необходими за удовлетворяване на условието за относителната грешка

$$\frac{||u_h^{it} - u_h||_2}{||u_h||_2} \leq 10^{-10}.$$

В примера предполагаме, че дясната част на системата, съответства на известно точно решение, u_h е решението на задачата по метода на крайните елементи, а u_h^{it} е приближено решение, съответстващо на итерация с номер „it“. Проведените числени експерименти обхващат четири итерационни метода, които са означени с техните съкращения, както следва:

- С „$G - S$“ е означен класическият метод на Гаус-Зайдел. Очакваният брой итерации е $n_{it} = O(N)$.
- С „SD“ е означен методът на най-бързото спускане. Броят на итерациите при него също е $n_{it} = O(N)$.
- „CG“ означава разгледания подробно в тази глава метод на спрегнатия градиент. За него е в сила оценката $n_{it} = O(n) = O(N^{1/2})$.
- В последната колонка на Таблица 1 са показани резултати за метода на спрегнатия градиент с преобуславяне, където за преобусловител е използвана модифицирана непълна факторизация на Холецки от тип $MIC(0)$. За този PCG метод е в сила оценката $n_{it} = O(n^{1/2}) = O(N^{1/4})$.

Таблица 1: Сходимост на итерационни методи.

n	$G-S$	SD	CG	PCG
4	82	185	26	11
8	309	698	45	15
16	1151	2592	91	19
32	4242	9541	177	27
64	15529	34818	351	38

Теоретичните оценки, както и представените резултати от числените експерименти ни дават възможност да направим следните изводи:

- Дори за моделната задача, при големи размерности, сходимостта на класическите итерационни методи е много бавна. Съществени са преимуществата на съвременните вариационни методи от тип метод на спрегнатия градиент и метод на спрегнатия градиент с преобуславяне.

- Разработването на оптимални и близки до оптималните преобусловители придобива особено важно значение, когато числото на обусловеност на изходната задача зависи от допълнителни параметри освен размерността. Такива параметри са скокове на коефициентите, коефициентната и/или мрежова анизотропия на задачата. Подобна роля в други важни приложения играят дебелината в теория на плочите и черупките, числото на Рейнолдс в уравненията на Навие-Стокс и др.