Лекция 15

Основы матричных вычислений

Рахуба М.В.

17.05.21

Итерационные методы для решения линейных систем 2

Метод Чебышёва

$$\|e_k\|_2 \le 2\left(\frac{\sqrt{\mathrm{cond}(A)}-1}{\sqrt{\mathrm{cond}(A)}+1}\right)^k \|e_0\|_2$$

Но надо знать λ_1, λ_n

① Оптимизация на подпространствах Крылова

$\frac{1}{2}x^TAx - b^Tx \Leftrightarrow J(x) = \|x - x_*\|_A$

$(A = A^T > 0)$

$$x_* = \underset{x\in\mathbb{R}^n}{\arg\min}\, J(x) \Leftrightarrow Ax_* = b$$

Послед. подпр. $L_1 \subset L_2 \subset \ldots \subset L_n = \mathbb{R}^n$, $\dim(L_k) = k$

На самом деле возможно $L_1 \subseteq \ldots \subseteq L_n$, $\dim(L_k) \le k$

$$\boxed{x_k = \underset{x_k \in x_0 + L_k}{\arg\min}\, J(x)}$$

Как выбрать L_k?

$$L_k = \mathcal{K}_k(A, f) = \mathrm{span}\{f, Af, A^2f, \ldots, A^{k-1}f\}$$

f: b или $r_0 = b - Ax_0$

$$A^k f \in K_k(A, f)$$

Например, если b — собств. век A: $\{b,\ \underset{\lambda b}{\underset{\parallel}{Ab}},\ \underset{\lambda^2 b}{\underset{\parallel}{A^2 b}}\}$

$\boxed{\text{Утв 1}}$ Пусть A: $\det(A) \neq 0$.

$$\exists\ k \leq n : \quad x_* = A^{-1} b \in K_k(A, b)$$

$\square$ $\exists\ k - \min$: $K_{k+1} = K_k$

$$A^k b = \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i A^i b$$

$$\alpha_0 \neq 0$$

$$\left(\text{Если } \alpha_0 = 0, \text{ то } A^{k-1} b = \sum_{i=0}^{k-2} \alpha_{i+1} A^i b\right)$$

$$\frac{1}{\alpha_0} A^k b = b + \frac{1}{\alpha_0} A \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i A^{i-1} b$$

$$A\Big(\underbrace{\frac{1}{\alpha_0} A^{k-1} b - \frac{1}{\alpha_0} \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i A^{i-1} b}_{x_*}\Big) = b \quad \blacksquare$$

② Метод сопряжённых градиентов (CG)

$A = A^T > 0$

$\frac{1}{2} x^T A x - b^T x$

$$x_k = \underset{x \in x_0 + K_k(A, r_0)}{\arg\min} \| x_* - x \|_A$$

Опр. 1) $(x, y)_A \overset{def}{=} x^T A y = (x, Ay)$

2) $\| x \|_A = \sqrt{(x, x)_A} = \sqrt{x^T A x}$

3) P^A – A-ортог. проектор, если

$(P^A)^2 = P^A$

$(P^A x, y)_A = (x, P^A y)_A$

(аналог $P^T = P$)

4) $x \perp_A y$, если $(x, y)_A = 0$

Утв. 2

$$x_k = \underset{x \in x_0 + K_k(A, r_0)}{\arg\min} \| x_* - x \|_A \iff x_* - x_k \perp_A K_k$$

$\in x_0 + K_k(A, r_0)$

$(\underbrace{Ax_* - Ax_k}_{b - Ax_k = r_k} \perp K_k)$

т.к.

$(x_* - x_k, z)_A = (x_* - x_k, Az) = \underset{= 0}{(Ax_* - Ax_k, z)}$

$\square$ $\|x_* - x\|_A = \|x_* - (x_0 + y)\|_A =$

$= \|(x_* - x_0) - y\|_A \to \min\limits_{y \in K_k(A, r_0)}$

$$x_* - x_0 = \underbrace{P^A(x_* - x_0)}_{K_k} + \underbrace{(I - P^A)(x_* - x_0)}_{\perp_A K_k}$$

P^A – на $K_k(A, r_0)$

$$\|(x_* - x_0) - y\|_A^2 = \|\underbrace{P^A(x_* - x_0) - y}_{\in K_k} + \underbrace{(I - P^A)(x_* - x_0)}_{\perp_A K_k}\|_A^2 =$$

$$= \|P^A(x_* - x_0) - y\|_A^2 + \|(I - P^A)(x_* - x_0)\|_A^2 \to \min_{y \in K_k(A, r_0)}$$

$$y = P^A(x_* - x_0)$$

$\Updownarrow$ $\quad \Downarrow (\cdot, z)_A \quad \Uparrow z = y - P^A(x_* - x_0)$

$$(y - P^A(x_* - x_0), z)_A = 0 \quad \forall z \in K_k$$

$$(y, z)_A = (P^A(x_* - x_0), z)_A$$

$$(\underset{x_k - x_0}{y}, z)_A = (x_* - x_0, \underbrace{P^A z}_{z})_A$$

$$(x_k - \cancel{x_0}, z)_A = (x_* - \cancel{x_0}, z)_A$$

$$(x_k - x_*, z)_A = 0$$ [redacted]

Пусть $x_0 = 0$

$\mathcal{V}_k$ с базисом V_k

$\mathcal{W}_k$ с базисом W_k

Хотим $\underbrace{x_* - x_k}_{\in \mathcal{V}_k} \perp \mathcal{W}_k$ (у нас $\mathcal{V}_k = \mathcal{W}_k = \mathcal{K}_k$)

$$x_k = V_k c$$

$$W_k^T (A x_k - b) = 0$$ (условие, что $A x_k - b \perp \mathcal{W}_k$)

$$W_k^T A V_k c = W_k^T b$$

$$W_k = V_k \Rightarrow \underbrace{V_k^T A V_k}_{\mathbb{R}^{k \times k}} c = V_k^T b$$

Т.е. можно найти базис V_k в $\mathcal{K}_k(A, r_0)$, вычислить проекционное сужение $V_k^T A V_k$ и решить систему,
Но можно ещё эффективнее (см. 3)

Обсуждение после лекции: $x_0 = 0$ $\quad \underbrace{x_* - x_k}_{\in \mathcal{K}_k = \mathcal{V}_k} \perp_A \mathcal{K}_k = \mathcal{W}_k$

$x_k \in \mathcal{V}_k \Rightarrow x_k = V_k c$,

$x_* - x_k \perp_A \mathcal{W}_k \Rightarrow \underbrace{A x_*}_{= b} - A x_k \perp \mathcal{W}_k \Rightarrow W_k^T (b - A V_k c) = 0$

3 Вывод коротких формул для CG

Пусть $p_1, \dots, p_k$ — A-ортог. базис в $\mathcal{K}_k$

$$x_k = x_0 + y_k = x_0 + \alpha_1 p_1 + \dots + \alpha_{k-1} p_{k-1} + \alpha_k p_k$$

α_i не зависит от k, т.к.

$(x_k - x_*, z)_A = 0$, $(x_0 - x_* + \alpha_1 p_1 + \dots + \alpha_k p_k, p_i)_A = 0$

$\alpha_i (p_i, p_i)_A = (x_* - x_0, p_i)_A$

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

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

$$\underbrace{b - A x_k}_{r_k} = \underbrace{b - A x_{k-1}}_{r_{k-1}} - \alpha_k A p_k$$

$$r_k \perp \mathcal{K}_k \Rightarrow r_k \perp p_k \Rightarrow$$

$$\underbrace{r_k^T p_k}_{0} = r_{k-1}^T p_k - \alpha_k p_k^T A p_k$$

$$\alpha_k = \frac{r_{k-1}^T p_k}{p_k^T A p_k}$$

$$\alpha_k = \frac{r_{k-1}^T p_k}{p_k^T A p_k}$$

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

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

Найдём p_k:

$$K_{k+1} = \{\overbrace{\{r_0, Ar_0, \ldots, A^{k-1} r_0\}}^{K_k}, A^k r_0\} = \{\{p_1, \ldots, p_k\}, p_{k+1}\}$$

$$p_{k+1} = A^k r_0 + \sum_{i=1}^{k} \gamma_i p_i$$

$$r_k = b - A\overset{x_0+y_k}{\overset{\parallel}{x_k}} = r_0 - A\overset{\in K_k(A, r_0)}{y_k} = r_0 + A \sum_{i=1}^{k} c_i A^{i-1} r_0$$

$\Downarrow$ (вычитаем)

$$p_{k+1} = r_k + \beta_1 p_1 + \ldots + \beta_k p_k$$

$$r_k \perp K_k \Rightarrow r_k \perp A p_i, \quad i < k$$

$$\cancelto{0}{(p_{k+1}, Ap_i)} = \cancelto{0}{(r_k, Ap_i)} + \beta_1 (p_1, Ap_i) + \ldots + \beta_k (p_k, Ap_i)$$

$$\beta_i (p_i, Ap_i) = 0$$

$$\beta_i = 0$$

$$\boxed{p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k}$$

$$(p_{k+1}, Ap_k) = (r_k, Ap_k) + \beta_k (p_k, Ap_k)$$

0

$$\boxed{\beta_k = -\frac{(r_k, Ap_k)}{(p_k, Ap_k)}}$$

Итог:

$$\alpha_k = \frac{(r_{k-1}, p_k)}{(Ap_k, p_k)} \overset{ДЗ}{=} \frac{(r_{k-1}, r_{k-1})}{(Ap_k, p_k)}$$

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

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

$$\beta_k = -\frac{(r_k, Ap_k)}{(p_k, Ap_k)} \overset{ДЗ}{=} \frac{(r_k, r_k)}{(r_{k-1}, r_{k-1})}$$

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

Проверьте (ДЗ):

$$x_{k+1} \in \text{span}\{x_k, x_{k-1}, r_k\}$$

Было на прошлой лекции:

$$x_{k+1} = x_k + \tau_k r_k \in \text{span}\{x_k, r_k\}$$