Επιστημονικοί Υπολογισμοί (Αρ. Γρ. ΄λγεβρα)

Επαναληπτικές μέθοδοι και Ημι-Επαναληπτικές Μέθοδοι

Πανεπιστήμιο Αθηνών

18 Απριλίου 2024

Στατικές και μη-στατικές επαναληπτικές μέθοδοι για την επίλυση Γραμμικών Συστημάτων

Δίνεται το γραμμικό σύστημα

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

όπου $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{n \times n}$, είναι μη ιδιάζων πίνακας, $\mathbf{x}$, $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^n$.

Οι επαναληπτικές μέθοδοι χρησιμοποιούνται όταν ο πίνακας **A** είναι :

- **Μεγάλης τάξης ($\sim 10^3 - 10^6$)**
- **Αραιός**
- **Συγκεκριμένης δομής**

Επαναληπτικές Μέθοδοι

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \qquad \longrightarrow \qquad \mathbf{x} = \mathbf{Gx} + \mathbf{k}$$

$$\mathbf{r}^{(m)} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}^{(m)} \qquad \text{υπόλοιπο}$$

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} + \tau \mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}^{(m)}$$

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \underbrace{(\mathbf{I} - \tau \mathbf{R}^{-1}\mathbf{A})}_{\mathbf{G}_\tau(\mathbf{R})}\mathbf{x}^{(m)} + \underbrace{\tau \mathbf{R}^{-1}\mathbf{b}}_{\mathbf{k}_\tau(\mathbf{R})}$$

$$\mathbf{x} = \underbrace{\mathbf{G}_\tau(\mathbf{R})}_{\text{επαναλ. πίνακας}} \mathbf{x} + \mathbf{k}_\tau(\mathbf{R})$$

Επιταχυντικές Επαναληπτικές μέθοδοι 1ου βαθμού

- Στατική επαναληπτική μέθοδος Richardson

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} + \tau \mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}^{(m)}\,, \qquad \mathbf{m} = \mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \cdots$$

- Μη-Στατική επαναληπτική μέθοδος Richardson

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} + \tau_{\mathbf{m}} \mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}^{(m)}\,, \qquad \mathbf{m} = \mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \cdots$$

Ο επαναληπτικός πίνακας στην **m** επανάληψη είναι:

$$\mathbf{G}(\tau_{\mathbf{m}}) = \mathbf{I} - \tau_{\mathbf{m}} \mathbf{R}^{-1}\mathbf{A}$$

Παρατηρήσεις

- Αν $\tau_{\mathbf{m}} = \tau \;\Rightarrow\;$ στατική ε.μ.
- Αν $\mathbf{R} = \mathbf{I} \;\Rightarrow\;$ μη-προβλέψιμη(non-predictioned) ε.μ.
- Αν $\tau = \mathbf{1}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{D} \;\Rightarrow\;$ ε.μ Jacobi
- Αν $\tau = \mathbf{1}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{D} - \mathbf{C_L} \;\Rightarrow\;$ ε.μ Gauss-Seidel

Αλγόριθμος ε.μ. Richardson

Συμβ.:

$$\mathbf{r}^{(m)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)} \quad \text{υπόλοιπο}$$

$$\mathbf{z}^{(m)} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}^{(m)} \quad \text{υπόλοιπο με προσυνθήκη (preconditioned residual)}$$

Για την υλοποίηση της μεθόδου Richardson εφαρμόζεται ο ακόλουθος αλγόριθμος :

Για $\mathbf{m} = \mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \cdots$

1. Επίλυση του γρ. συστήματος $\mathbf{R}\,\mathbf{z}^{(m)} = \mathbf{r}^{(m)}$
2. Υπολογισμός της παραμέτρου επιτάχυνσης $\tau_{\mathbf{m}}$
3. Ενημέρωση της λύσης $\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} + \tau_{\mathbf{m}}\mathbf{z}^{(m)}$
4. Ενημέρωση του υπολοίπου $\mathbf{r}^{(m+1)} = \mathbf{r}^{(m)} - \tau_{\mathbf{m}}\mathbf{A}\mathbf{z}^{(m)}$

Πίνακες με προρύθμιση (Preconditioned matrices)

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \qquad \longrightarrow \qquad \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Ax} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{b}$$

Πίνακες Προρύθμισης

1. **Αλγεβρικοί** 2. **Συναρτησιακοί**

- **Διαγώνιος** $\mathbf{R} = \mathbf{D} = \mathbf{diag}(a_{11}, a_{22}, \cdots a_{nn})$

Αν **A** συμμετρικός και θετικα ορισμένος τότε ο $\mathbf{R} = \mathbf{D}$ είναι αποτελεσματικός.

Αν **A** μη συμμετρικός και θετικα ορισμένος τότε θέτουμε $r_{ii}^2 = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2$.

- ***Μη πλήρης (Incomplete) LU*** παραγοντοποίηση (**ILU**) και

μη πλήρης (Incomplete) Cholesky παραγοντοποίηση (**IC**)

(Υπολογισμός της παραγοντοποίησης μόνο για τα μή μηδενικά στοιχεία του **A**).

- ***Πολυωνυμικός*** $\mathbf{R}^{-1} = p_n(\mathbf{A})$, $\mathbf{n}$ μικρό
- ***Με ελάχιστα τετράγωνα*** $\mathbf{R}^{-1} = p_s(\mathbf{A})$, προσέγγιση του $\mathbf{A}^{-1}$ με ένα πολυώνυμο ελαχίστων τετραγώνων $p_s(\mathbf{A})$

Μελέτη σύγλισης της ε.μ. Richardson

Θεώρημα 1 : Αν $\mathbf{R}$ είναι $\mathbf{n} \times \mathbf{n}$ **μη ιδιάζων** πίνακας τότε

$$\text{η στατική ε.μ Richardson συγκλίνει} \Leftrightarrow \frac{2\mathrm{Re}(\lambda_i)}{\tau|\lambda_i|^2} > 1\,, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

όπου $\lambda_i \in \mathbf{R}$ είναι οι ιδιοτιμές του $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{A}$.

Θεώρημα 2 : Αν $\mathbf{R}$ είναι $\mathbf{n} \times \mathbf{n}$ **μη ιδιάζων** πίνακας και ο $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{A}$ έχει **θετικές πραγματικές** ιδιοτιμές $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ τότε

$$\text{η στατική ε.μ Richardson συγκλίνει} \Leftrightarrow 0 < \tau < 2/\lambda_1.$$

Επίσης η φασματική ακτίνα $\rho(\mathbf{G}_\tau)$ ελαχιστοποιείται για

$$\tau_o = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_n}$$

και η αντίστοιχη τιμή της δίνεται από τον τύπο

$$\rho(\mathbf{G}_{\tau_o}) = \frac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n}$$

Ημι-Επαναληπτικές Μέθοδοι

Γραμμική στατική Επαναληπτική μέθοδος 1ου βαθμού

$$\mathbf{Au} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{G}\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{k}\ , \qquad n = 0, 1, 2, \cdots$$

$\mathbf{u}^{(0)}$ αυθαίρετο

Σχηματισμός της νέας ακολουθίας:

$$\mathbf{v}^{(n)} = \sum_{k=0}^{n} a_k(n)\mathbf{u}^{(k)}\ , \qquad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{2}$$

Σύγκλιση της Ημι-Επαναληπτικής Μεθόδου

Ακολουθίες διαδοχικών σφαλμάτων

$$\epsilon^{(\mathbf{k})} = \mathbf{u}^{(\mathbf{k})} - \mathbf{u}$$

$$\eta^{(\mathbf{k})} = \mathbf{v}^{(\mathbf{k})} - \mathbf{u}$$

$$\epsilon^{(\mathbf{k})} = \mathbf{G}^{\mathbf{k}} \epsilon^{(\mathbf{0})}$$

$$\eta^{(\mathbf{n})} = \left(\sum_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}^{\mathbf{n}} \mathbf{a}_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) \mathbf{G}^{\mathbf{k}} \right) \epsilon^{(\mathbf{0})}$$

Ορίζουμε το πολυώνυμο

$$\mathbf{P}_{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}^{\mathbf{n}} \mathbf{a}_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) \mathbf{x}^{\mathbf{k}} , \qquad \mathbf{n} = \mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \cdots$$

οπότε έχουμε

Πρόβλημα Ελαχιστοποίησης

Με την υπόθεση ότι ο πίνακας **G** έχει **πραγματικές** ιδιοτιμές λ_i τέτοιες ώστε

$$\alpha \le \lambda_i \le \beta < 1$$

ισχύει

$$||P_n(G)||_2 = \rho(P_n(G)) = \max_{\lambda_i} |P_n(\lambda_i)| \le \max_{\alpha \le \lambda \le \beta} |P_n(\lambda)|$$

Έτσι καταλήγουμε στο ακόλουθο πρόβλημα ελαχιστοποίησης

$$\min_{P_n(1)=1} \{ \max_{\alpha \le \lambda_i \le \beta < 1} |P_n(\lambda)| \}$$

Η λύση του ανωτέρω προβλήματος γίνεται με τη χρήση των πολυωνύμων Chebychev ως εξής:

Μετασχηματισμός $\gamma \; : \; [\alpha, \; \beta] \; \rightarrow \; [0, \; 1]$

$$\gamma = \frac{2\lambda - (\beta + \alpha)}{\beta - \alpha} \leftrightarrow \lambda = \frac{(\beta - \alpha)\gamma + \beta + \alpha}{2}$$

Χρήση των πολυωνύμων Chebychev

Ορίζουμε το πολυώνυμο

$$\mathbf{Q_n}(\gamma) = \mathbf{P_n}(\lambda)$$

οπότε έχουμε

$$\max_{\alpha \leq \lambda \leq \beta} |\mathbf{P_n}(\lambda)| = \max_{-\mathbf{1} \leq \gamma \leq \mathbf{1}} |\mathbf{Q_n}(\gamma)|$$

Το πρόβλημα είναι η εύρεση ενός πολυωνύμου $\mathbf{Q_n}(\gamma)$ βαθμού $\leq \mathbf{n}$: $\mathbf{Q_n}(\mathbf{z}) = \mathbf{1}$ (όπου $\mathbf{z} = \gamma(\mathbf{1})$) και η ποσότητα

$$\max_{-\mathbf{1} \leq \gamma \leq \mathbf{1}} |\mathbf{Q_n}(\gamma)|$$

να γίνεται ελάχιστη.

Η λύση στο παραπάνω πρόβλημα δίνεται από το ακόλουθο θεώρημα :

Θεώρημα

Εστω $\mathbf{n}$ ένας σταθερός μη αρνητικός ακέραιος και $\mathbf{z}$ οποιοσδήποτε σταθερός πραγματικός αριθμός με $\mathbf{z} > 1$. Αν θέσουμε

$$\mathbf{P_n(x) = \frac{T_n(x)}{T_n(z)}} \ ,$$

όπου $\mathbf{T_n(x)}$ είναι το πολυώνυμο Chebychev $\mathbf{n}$-βαθμού που δίνεται από τον τύπο

$$\begin{aligned} \mathbf{T_n(x)} &= \mathbf{\cos(n\cos^{-1}x)} \\ &= \mathbf{\frac{1}{2}\left[\left(x+\sqrt{x^2-1}\right)^n + \left(x+\sqrt{x^2-1}\right)^{-n}\right]} \\ &= \mathbf{\cosh(n\cosh^{-1}x)} \end{aligned}$$

τότε

$$\mathbf{P_n(z) = 1}$$

και

$$\max_{-1\le x\le 1} |\mathbf{P_n(x)}| = \mathbf{\frac{1}{T_n(z)}}$$

Επιπλέον, αν $\mathbf{Q_n(x)}$ είναι οποιοδήποτε πολυώνυμο βαθμού $\leq \mathbf{n}$ τέτοιο ώστε $\mathbf{Q(z) = 1}$ και

$$\max_{-1 \leq x \leq 1} |\mathbf{Q(x)}| \leq \max_{-1 \leq x \leq 1} |\mathbf{P_n(x)}|$$

τότε

$$\mathbf{Q(x) = P_n(x)}$$

Χρήσιμη αναδρομική σχέση των πολυωνύμων Chebychev

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \qquad n = 1, 2, \cdots$$

Αλγόριθμος της Ημι-Επαναληπτικής μεθόδου Chebychev

B1. Διάβασε ϵ, **max_iter**

B2. $\sigma = \dfrac{\beta - \alpha}{2 - \beta - \alpha}$, $\qquad \bar{\rho} = \dfrac{2}{2 - \beta - \alpha}$

B3. $\mathbf{v}^{(0)} =$ κάποια αρχική προσέγγιση

B4. $\mathbf{v}^{(1)} = \bar{\rho}(\mathbf{G}\mathbf{v}^{(0)} + \mathbf{k}) + (1 - \bar{\rho})\mathbf{v}^{(0)}$

B5. $\rho_2 = \left(1 - \frac{1}{2}\sigma^2\right)^{-1}$

B6. $\mathbf{n} = 1$

B7. $\mathbf{v}^{(2)} = \rho_2 \left(\bar{\rho}(\mathbf{G}\mathbf{v}^{(1)} + \mathbf{k}) + (1 - \bar{\rho})\mathbf{v}^{(1)}\right) + (1 - \rho_2)\mathbf{v}^{(0)}$

B8. *Επανάλαβε*

$\mathbf{n} = \mathbf{n} + 1$

.....Αλγόριθμος της Ημι-Επαναληπτικής μεθόδου Chebychev

B8. *Επανάλαβε*

$\mathbf{n} = \mathbf{n} + 1$

$$\rho_{n+1} = \left(1 - \frac{1}{4}\sigma^2 \rho_n\right)^{-1}$$

$$\mathbf{v}^{(n+1)} = \rho_{n+1}\left(\overline{\rho}(\mathbf{G}\mathbf{v}^{(n)} + \mathbf{k}) + (1 - \overline{\rho})\mathbf{v}^{(n)}\right) + (1 - \rho_{n+1})\mathbf{v}^{(n-1)}$$

όσο ισχύει ($\mathbf{n} < \mathbf{max\_iter}$ και $||\mathbf{v}^{(n+1)} - \mathbf{v}^{(n)}|| \geq \epsilon$)

B9. *Αν* $\mathbf{n} < \mathbf{max\_iter}$ τύπωσε τη λύση $\mathbf{v}^{(n+1)}$

διαφορετικά

τύπωσε(¨Οχι σύγκλιση μετά από **max_iter** επαναλήψεις¨)

B10.Τέλος

Η μέθοδος γενικών διευθύνσεων (Gradient)
(ή απότομης καθόδου(Stepest Descent))

Αν **A** $n \times n$ **συμμετρικός** και **θετικα** ορισμένος (**SPD**) πίνακας τότε το συναρτησοειδές

$$\mathbf{Q} : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}\,,$$

που ορίζεται από τον τύπο

$$\mathbf{Q}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{x}^T\mathbf{b}\,,$$

λέγεται ***ενέργεια*** του γραμμικού συστήματος $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$.

Λήμμα : Αν **R** είναι $\mathbf{n} \times \mathbf{n}$ μη ιδιάζων πίνακας και $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^n$ τότε για τη συνάρτηση $\mathbf{Q}(\mathbf{x})$ ισχύει

$$\mathbf{x}^* = \min_{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n} \mathbf{Q}(\mathbf{x}) \Leftrightarrow \quad \mathbf{A}\mathbf{x}^* = \mathbf{b}.$$