ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ

ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΑΚΑΔ. ΕΤΟΣ 2002-2003

ΠΡΟΧΩΡΗΜΕΝΕΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΚΑΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ ΕΠΙΛΥΣΗΣ

Κ.Χ. ΓΙΑΝΝΑΚΟΓΛΟΥ, Επ. Καθηγητής, Τομέας Ρευστών, Τμήμα Μηχανολόγων Ε.Μ.Π.

ΤΡΙΤΗ ΕΝΟΤΗΤΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ

Η ΜΕΘΟΔΟΣ GMRES

- Εισαγωγή στη μέθοδο GMRES (Generalized Minimal Residual Technique). Τοποθέτησή της σε σχέση με τη μέθοδο των συζυγών κλίσεων. Σε ποία προβλήματα ενδείκνυται η χρήση του.
- GMRES με επανεκίνηση (Restarted GMRES).
- Δημιουργία ορθοκανονικής βάσης με τη διαδικασία Arnoldi. Σχετικά θεωρήματα.
- Η μέθοδος της πλήρους ορθογωνοποίησης (FOM, Full Orthogonalization Method). Παρατηρήσεις.
- Πρακτική υλοποίηση του GMRES σε κώδικα. Απαιτούμενα βοηθητικά εργαλεία-υποπρογράμματα.
- GMRES με προδιάθεση (Preconditioned GMRES).

ΣΥΝΔΕΣΗ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΣΥΖΥΓΩΝ ΚΛΙΣΕΩΝ

Η Μέθοδος των Συζυγών Κλίσεων (CG, Conjugate Gradient Method) είναι μιά αποτελεσματική αριθμητική μέθοδος για την επίλυση συμμετρικών και θετικά ορισμένων μητρώων. Εδώ υπενθυμίζονται βασικά χαρακτηριστικά της ως εισαγωγή τού GMRES, αλλά καί γιά νά γίνει μιά χρήσιμη αντιδιαστολή μέ αυτό. Η εισαγωγική αυτή παρουσίαση θά είναι ιδιαίτερα σύντομη.

Υπενθυμίζεται ότι θετικά ορισμένο είναι ένα μητρώο A όταν γιά κάθε μη-μηδενικό διάνυσμα x ισχύει ότι : $x^T A x > 0$

Τονίζεται δέ ότι μάς ενδιαφέρουν γενικά τά θετικά ορισμένα μητρώα γιατί έχουν τήν παρακάτω πολύ χρήσιμη ιδιότητα:

« Αν μας ενδιαφέρει ή λυση τού συστήματος $Ax=b$ με $A=$ συμμετρικό, θετικά ορισμένο, τότε ή λύση που θά προκύψει έχει τήν επιπλέον ιδιότητα νά ελαχιστοποιεί τή λεγόμενη τετραγωνική μορφή $f(x)=\frac{1}{2}x^T A x - b^T x + c$, όπου c αυθαίρετη σταθερά. » (απόδειξη;)

Η τεχνική CG στηρίζεται στή γένεση μιάς αλληλουχίας προσεγγιστικών λύσεων (iterates) μαζί μέ τά αντίστοιχα υπόλοιπα (residuals) καθώς καί στήν ανίχνευση-προσδιορισμό κατευθύνσεων (search directions) μέ τή βοήθεια τών οποίων θά ανανεώνονται οι προσεγγιστικές λύσεις καί τά υπόλοιπα. Παρόλο που τό μήκος τής αλληλουχίας μπορεί νά είναι ιδιαίτερα μεγάλο, μόνο ένας μικρός αριθμός διανυσμάτων χρειάζονται αποθήκευση στή μνήμη. Σε κάθε επανάληψη του σχήματος CG, απαιτούνται δύο εσωτερικά γινόμενα διανυσμάτων γιά τόν προσδιορισμό βοηθητικών βαθμωτών ποσοτήτων, με σκοπό τήν ικανοποίηση συγκεκριμένων συνθηκών ορθογωνιότητας (orthogonality conditions). Γιά συμμετρικά, θετικά ορισμένα γραμμικά συστήματα, οί συνθήκες αυτές εξασφαλίζουν οι κάθε φορά ή απόσταση από τήν πραγματική λύση ελαχιστοποιείται.

Αν είναι i ο δείκτης των επαναλήψεων, η ανανέωση (από την $i-1$ στην i επανάληψη) της προσεγγιστικής λύσης και του αντίστοιχου υπόλοιπου θα είναι

$$x^i = x^{i-1} + \alpha_i p^i$$

$$r^i = r^{i-1} - \alpha q^i \quad , \quad \text{όπου} \quad q^i = A p^i$$

Εδώ, η επιλογή $\alpha = \alpha_i = \dfrac{(r^{i-1})^T r^{i-1}}{(p^i)^T A p^i}$ ελαχιστοποιεί το $(r^i)^T A^{-1} r^i$

για κάθε δυνατή επιλογή της παραμέτρου α στην τελευταία εξίσωση.

Επίσης, η σχέση ανανέωσης των διευθύνσεων ανίχνευσης p^i κάνει χρήση του "πρόσφατου" υπόλοιπου και γράφεται ως

$$p^i = r^i + \beta_{i-1} p^{i-1}$$

όπου η επιλογή $\beta_i = \dfrac{(r^i)^T r^i}{(r^{i-1})^T r^{i-1}}$ εξασφαλίζει ότι τα p^i και Ap^{i-1}

(ή ισοδύναμα τα r^i και r^{i-1}) είναι ορθογώνια. Στην πραγματικότητα, μπορούμε να δείξουμε ότι η επιλογή ενός τέτοιου β_i κάνει τα p^i και r^i ορθογώνια ως προς ΚΑΘΕ προηγούμενο Ap^j και r^j, αντίστοιχα.

Ακολουθεί αλγόριθμος-ψευδοκώδικας για τη μέθοδο CG. Για συντομία, δίνεται η έκδοση με προδιάθεση της CG (Preconditioned CG, PCG), όπου η προδιάθεση γίνεται με το μητρώο M. Διαλέξτε $M = I$ για να έχετε την απλή (χωρίς προδιάθεση) έκδοση της μεθόδου.

Αξίζει, ψεχνώντας στιγμιαία την προδιάθεση, να μετρήσουμε τις "πράξεις" που χρειάζεται ο αλγόριθμος CG (ανά επανάληψη):

- Ένας πολλαπλασιασμός μητρώου με διάνυσμα
- τρεις ανανεώσεις διανυσμάτων (των x, p, r)
- Ένα εσωτερικό γινόμενο (δύο διανυσμάτων)

◆ Αλγόριθμος PCG :

Επιλογή αρχικής λύσης x^0

Εύρεση του αντίστοιχου υπολοίπου $r^0 = b - Ax^0$

FOR $i = 1, 2, 3, \ldots$

λύσε το σύστημα $Mz^{i-1} = r^{i-1}$

υπολόγισε την ποσότητα $\rho_{i-1} = (r^{i-1})^T z^{i-1}$

IF $(i = 1)$ THEN

$p^1 = z^0$

ELSE

$\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$

$p^i = z^{i-1} + \beta_{i-1} p^{i-1}$

ENDIF

υπολόγισε το διάνυσμα $q^i = Ap^i$

υπολόγισε την ποσότητα $\alpha_i = \rho_{i-1} / (p^i)^T q^i$

ανανέωσε την προσ. λύση $x^i = x^{i-1} + \alpha_i p^i$

ανανέωσε το αντίστοιχο υπόλοιπο $r^i = r^{i-1} - \alpha_i q^i$

Έλεγξε τη σύγκλιση. Συνέχισε αν χρειάζεται με την επόμενη τιμή του i

END

Ακολουθούν σχόλια γιά τή CG και τήν εφαρμογή της πού είναι χρήσιμο νά συγκριθούν αργότερα με οτι θά μάθουμε γιά τήν τεχνική GMRES :

- Η (απλή) CG δημιουργεί τήν προσεγγιστική λύση x^i ως ενα στοιχείο του χωρου

$$x^0 + \text{span}\{ r^0, Ar^0, \ldots, A^{i-1} r^0 \}$$

Ετσι ωστε νά πετυχαίνεται ή ελαχιστοποίηση του

$$(x^i - \hat{x})^T A (x^i - \hat{x}) \qquad , \hat{x} = \text{ακριβής λύση του } Ax=b$$

Η υπαρξη ελαχίστου εξασφαλίζεται μονο αν A-συμμετρικό καί θετικά ορισμένο.

- Η PCG δημιουργεί τήν προσεγγιστική λυση x^i σε ένα διαφορετικό υπόχωρο, ικανοποιώντας ομως τήν ιδια απαιτηση ελαχιστοποίησης (στό νεο υπόχωρο, ασφαλώς)

- Ο προδιαθέτης M πρεπει νά είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος.

- Η ελαχιστοποίηση τού σφάλματος (απόκλιση από τήν ακριβή λύση) αποδεικνύεται ισοδύναμη τού νά είναι M^{-1}-ορθογωνια τά υπολοιπα $r^i = b - Ax^i$. Αυτό σημαίνει

$$(r^i)^T M^{-1} r^j = 0 \qquad , \text{γιά } i \neq j$$

Επειδή γιά συμμετρικό μητρώο A, μιά ορθογωνική βάση τού (Krylov!) υπόχωρου $\{ r^0, Ar^0, \ldots, A^{i-1} r^0 \}$ μπορεί να δημιουργηθεί μέ αναδρομικό τύπο τριών στοιχείων (περιορισμένες απαιτήσεις "μνήμης"), ενας τετοιος αναδρομικός τυπος αρκεί γιά νά δημιουργηθούν καί τά υπολοιπα. Στήν τεχνική CG, χρησιμοποιούνται δύο "πεπλεγμένοι" αναδρομικοί τύποι δύο στοιχείων. Ο ενας ανανεώνει τά υπόλοιπα χρησιμοποιώντας τά διανύσματα - κατευθύνσεις ανίχνευσης. Ο αλλος ανανεώνει τίς ιδιες τίς κατευθύνσεις ανίχνευσης μέ τή βοήθεια τών πιο πρόσφατα υπολογισμένων υπολοίπων. Αυτοί οί λόγοι κάνουν τήν τεχνική CG πολύ πλεονεκτική γιά τήν επίλυση τετοιων προβλημάτων.

Τελος, δίνονται σε περίληψη, σχόλια γιά τή σύγκλιση τής Μεθόδου CG :

- Τό σφαλμα της μεθόδου CG μπορεί να φραχθεί από υπολογίσιμα ορια, τά οποία είναι συναρτήσεις του φασματικού αριθμού κατάστασης (spectral condition number) K_2 τού μητρωου $M^{-1}A$ (ή βεβαια του A, αν δέ χρησιμοποιείται προδιαθεση)
Υπενθυμίζεται οτι αν λ_{max} και λ_{min} είναι οι ακραίες ιδιοτιμές ενός συμμετρικού καί θετικά ορισμένου μητρωου B τότε $K_2(B) = \dfrac{\lambda_{max}(B)}{\lambda_{min}(B)}$.

Ετσι, αν το μητρώο συντελεστών A και ό προδιαθετης M είναι συμμετρικά και θετικά ορισμένα μητρώα και $\hat{x}$ είναι ή ακριβής λύση του συστήματος, τότε ή εφαρμογή τής PCG οδηγεί σε φραγμένο σφαλμα γιά την i-επαναληψη σύμφωνα μέ τή σχέση

$$\| x^i - \hat{x} \|_A \le 2\alpha^i \, \| x^0 - \hat{x} \|_A$$

οπου

$$\alpha = \frac{\sqrt{K_2} - 1}{\sqrt{K_2} + 1}$$

και ή νορμα που χρησιμοποιείται είναι η $\quad \| y \|_A^2 = (y, Ay) = y^T A y$

Η παραπάνω σχέση δείχνει οτι ο αριθμός επαναλήψεων που απαιτείται είναι αναλογος του $\sqrt{K_2}$, αν στόχος μας είναι μια συγκεκριμένη μείωση του σφαλματος.

- Από τα προηγουμενα φαίνεται αμέσως ενα ακόμα συμπέρασμα που συνηγορεί υπέρ τής προδιάθεσης κατά τή χρήση τής CG (και οχι μόνο...) :
« Η CG συγκλίνει "πολύ γρήγορα" (τουλάχιστον αν μετρο εχουμε τήν A-νόρμα) οταν τό $K_2 \sim 1$! »

ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΗ ΜΕΘΟΔΟ GMRES

Η μεθοδος GMRES (Generalized Minimal Residual, Μεθοδος Γενικευμένης Ελαχιστοποίησης Υπολοίπου) αναπτύχθηκε από τόν Youcef Saad στό Πανεπιστήμιο τού Yale. Αφορά τήν επίλυση γραμμικών (επεκτείνεται ομως και σέ μή-γραμμικά) συστημάτων πού τά μητρώα τών συντελεστών τους δέν είναι συμμετρικά. Ιστορικά, περνώντας από τό CG (συμμετρικά, θετικά ορισμένα μητρώα) στό GMRES (μή-συμμετρικά μητρώα), αξίζει νά αναφερθεί μιά "ενδιαμεση" μεθοδος, ή MINRES πού χρησιμοποιείται γιά συμμετρικά αλλά μή-ορισμενα μητρωα.

Η GMRES δημιουργεί καί στή συνεχεια χρησιμοποιεί μιά αλληλουχια ορθογωνιων διανυσματων (ωστε από αυτά νά δημιουργήσει μιά "νέα" προσεγγιστική λύση), μόνο πού τό γεγονός οτι δέν εχουμε πλεον συμμετρικά μητρωα καθιστά αδύνατη τή χρήση σύντομων αναδρομικών τύπων. Αντίθετα (δυστυχώς!) ολα τά προηγουμενα διανύσματα πρεπει νά εχουν αποθηκευθεί καί νά είναι διαθέσιμα κατά τον υπολογισμό του επομενου - ορθογώνιου ως πρός αυτά - διανύσματος. Γιά τό λόγο αυτό θά αναφερθούμε αργοτερα καί θά αναλύσουμε τή λεγομενη μεθοδο "GMRES μέ επανεκκίνηση" (Restarted GMRES)

Στή μεθοδο CG, τά υπολοιπα αποτελούν μιά ορθογωνική βάση στό χώρο $\text{span}\{r^0, Ar^0, A^2r^0, \ldots\}$. Στή GMRES, ή βάση αυτή δημιουργείται ρητά με εναν αλγοριθμο τής μορφής

$$w^i = A v^i$$

FOR $k = 1, 2, \ldots, i$

$$w^i = w^i - (w^i, v^k)\, v^k$$

END

$$v^{i+1} = \frac{w^i}{\|w^i\|}$$

Ο αλγόριθμος αυτός θυμίζει τήν τροποποιημένη ορθογωνοποίηση Gram-Schmidt. Όταν αυτή εφαρμόζεται στόν υπόχωρο Krylov

$$K_m(A, r^0) = \text{span}\{ r^0, Ar^0, A^2 r^0, \dots, A^{m-1} r^0 \}$$

ή δημιουργία της βάσης ονομάζεται Μέθοδος Arnoldi.

Στή GMRES, οί προσεγγιστικές λύσεις x^i δημιουργούνται μέ τή σχέση

$$x^i = x^0 + \beta_1 v^1 + \beta_2 v^2 + \dots + \beta_i v^i$$

όπου οί συντελεστές β_1, β_2, κλπ πρέπει νά υπολογιστούν σέ τρόπο πού νά ελαχιστοποιεί τή νόρμα τού υπολοίπου $\| b - Ax^i \|$. Είναι όμως πολύ σημαντικό νά τονιστεί ότι ή ελαχιστοποίηση τής νόρμας τού υπολοίπου πρέπει νά πραγματοποιηθεί χωρίς νά έχει (προηγουμένα) υπολογιστεί ή αντίστοιχη προσεγγιστική λύση x^i.

Χωρίς επανεκκίνηση ή GMRES συγκλίνει το πολύ σέ N βήματα ($N \times N$ ας είναι ή διάσταση τού μητρώου A). Η παρατήρηση αυτή είναι πρακτικά χωρίς ιδιαίτερη σημασία αφού γιά μεγάλης κλίμακας προβλήματα ό αριθμός αυτός είναι απαγορευτικά μεγάλος. Γιά τό λόγο αυτό χρησιμοποιείται ή επανεκκίνηση, δηλ. Restarted GMRES ή GMRES(m). Στήν παραλλαγή αυτή επιλέγεται ένας "μικρός" αριθμός m (θά μπορούσαμε να πούμε από την πείρα σέ τέτοιες εφαρμογές, ότι το m γενικά είναι στό διάστημα $5 \div 30$) ώστε οί αναδρομικές σχέσεις νά φθάνουν μόνο μέχρι βάθους m. Βέβαια αυτό απαιτεί επαναλήψεις, δίνοντας κάθε φορά τή νέα προσεγγιστική λύση x^i συναρτήσει τής παλιάς x^{i-1} και ενός αθροίσματος όρων, τής μορφής

$$x^i = x^{i-1} + \sum_{j=1}^{m} \beta_j v^j$$

ΒΑΣΙΚΟΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ARNOLDI

Ο βασικός αλγόριθμος Arnoldi δημιουργεί μιά ορθοκανονική βάση m διανυσμάτων $(v^1, v^2, \dots, v^m)$ μέ δοσμένο τό πρώτο διάνυσμα v^1.

Εξ ορισμού, για τα στοιχεία τής βάσης ισχύουν ότι

$$(v^i, v^j) = 0 \quad \text{αν} \quad i \neq j$$

$$(v^i, v^j) = 1 \quad \text{αν} \quad i = j$$

Η παρένθεση σημαίνει παντού τό εσωτερικό γινόμενο δυο διανυσμάτων.

ΒΗΜΑ 1: Επιλογή v^1, μέ $\|v^1\| = 1$

ΒΗΜΑ 2:

FOR $j = 1, 2, \dots, m$

FOR $i = 1, 2, \dots, j$

υπολογισμός $h_{i,j} = (Av_j, v_i)$

END

υπολογισμός τού $w^j = Av^j - \sum_{i=1}^{j} h_{i,j} v^i$

υπολογισμός τού βαθμωτού $h_{j+1,j} = \|w^j\|_2$

αν $h_{j+1,j} = 0$ STOP

υπολογισμός ενός στοιχείου τής βάσης $v^{j+1} = \dfrac{w^j}{h_{j+1,j}}$

END

Οι βοηθητικές ποσότητες $h_{i,j}$ συνθέτουν τό τετραγωνικό $(m \times m)$ μητρώο H_m. Τό μητρώο αυτό είναι άνω τριγωνικό. Επιπλέον βρίσκεται και η ποσότητα $h_{m+1,m}$. Μαζί συνθέτουν τό (άνω τριγωνικό) $(m+1 \times m)$ Hessenberg μητρώο $\overline{H}_m$. Τό H_m προκύπτει απο το $\overline{H}_m$ διαγράφοντας τήν τελευταία γραμμή του.

Πρόταση Π1 :

Αν (N×N) είναι η διάσταση του μητρώου A, δημιουργούμε το μητρώο ϑ^m (διάστασης N×m) συνθέτοντας τα m (πρώτα) διανύσματα της βάσης που βρήκαμε. Τα διανύσματα αυτά αποτελούν δηλ. τις στήλες του ϑ^m.

Ισχύουν οι σχέσεις:

$$A\vartheta^m = \vartheta^m H_m + w^m e_m^T \qquad (1)$$
$$= \vartheta^{m+1}\overline{H}_m \qquad (2)$$

και

$$(\vartheta^m)^T A \vartheta^m = H_m \qquad (3)$$

Απόδειξη:

Στον αλγόριθμο Arnoldi είχαμε ότι :

$$\left.\begin{aligned} w^j &= Av^j - \sum_{i=1}^{j} h_{i,j} v^i \\ v^{j+1} &= \frac{w^j}{h_{j+1,j}} \end{aligned}\right\} \Rightarrow Av^j = h_{j+1,j} v^{j+1} + \sum_{i=1}^{j} h_{i,j} v^i$$

δηλαδή, συνοψίζοντας σε μία άθροιση : $Av^j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j} v^i$

Σε μητρική γραφή είναι η πρός απόδειξη εξίσωση (2), $A\vartheta^m = \vartheta^{m+1}\overline{H}_m$.

Γνωρίζοντας ότι η τελευταία γραμμή του $\overline{H}_m$ περιέχει μόνο το στοιχείο $h_{m+1,m}$ αυτή η σχέση ξαναγράφεται ως

$$A\vartheta^m = \vartheta^m H_m + h_{m+1,m} v^{m+1} = \vartheta^m H_m + w^m e_m^T, \quad (1) \text{ ο.ε.δ.}$$

Τελος, πολλαπλασιάζουμε την (1) με το $(\vartheta^m)^T$ και εχουμε

$$(\vartheta^m)^T A\vartheta^m = \underbrace{(\vartheta^m)^T\vartheta^m}_{\text{ταυτοτικός πίνακας}} H_m + \underbrace{(\vartheta^m)^T w^m e_m^T}_{\text{Μηδέν, λογω ορθογωνιότητας των } (v^1, v^2, \dots, v^m)} = H_m, \quad (3) \text{ ο.ε.δ.}$$

Η Μέθοδος της Πλήρους Ορθογωνοποίησης FOM

Η ιδέα τού Arnoldi να χρησιμοποιηθεί ή τεχνική της πλήρους ορθογωνοποίησης (Full Orthogonalization Method, FOM) σημαίνει την αναζήτηση προσεγγιστικής λύσης x^m στο χώρο $x^0 + K_m(A, r^0)$, οπου τό σύμβολο K_m συμβολίζει υπόχωρο Krylov με βάση διάστασης m, γιά την οποία να ικανοποιείται ή συνθήκη Galerkin, δηλαδή:

$$(b - Ax^m) \perp K_m(A, r^0)$$

Η Arnoldi-FOM μέθοδος υλοποιείται με τόν παρακάτω αλγοριθμο:

ΒΗΜΑ 1: Αρχική επιλογη x^0. Ευρεση αρχικου υπολοίπου $r^0 = b - Ax^0$

Υπολογισμός $v^1 = r^0 / \|r^0\|_2$

Μηδενισμός του μητρωου (διάστασης $m \times m$) H_m, $h_{i,j} = 0$

ΒΗΜΑ 2:

FOR $j = 1, 2, \dots, m$

  υπολογισμός τού $w^j = Av^j$

  FOR $i = 1, 2, \dots, j-1$

    $h_{i,j} = (w^j, v^i)$

    $w^j = w^j - h_{i,j} v^i$

  END

  υπολογισμός του $h_{j+1,j} = \|w^j\|_2$

  Αν $h_{j+1,j} = 0$, εκτελείται το ΒΗΜΑ 3

  υπολογισμός του $v^{j+1} = \dfrac{w^j}{h_{j+1,j}}$

END

ΒΗΜΑ 3: Σχηματισμός τής προσεγγιστικής λύσης $x^m = x^0 + \vartheta^m B_m$

(οπου B_m εναι τό διάνυσμα στήλης με τούς m συντελεστές β_j)

Ισχύει:

$$B_m = H_m^{-1} (\|r^0\|_2 e_1)$$

Παρατηρήσεις:

- Θά ήταν ενδιαφέρον νά μπορούσαμε νά βρίσκουμε τό m "δυναμικά". Δηλαδή, να μπορούσαμε νά βρίσκουμε τό υπόλοιπο πού αντιστοιχεί στην προσεγγιστική λύση x^m χωρίς προηγούμενα νά έχουμε βρεί το ίδιο τό x^m. Ετσι, θά μπορούσαμε νά αποφασίσουμε το πότε σταματάμε!!

- Στά προηγούμενα αναφέρεται τό διάνυσμα e_1 ή τό e_m κλπ. Πρόκειται για τό πρώτο ή τό m-ιοστό (αντίστοιχα) διάνυσμα στήλης του ταυτοτικού μητρώου (identity matrix) διάστασης $(m \times m)$ ή $(m+1 \times m+1)$ (Κρίνετε μόνοι σας, κατά περίπτωση)

Πρόταση Π2:

(Σχετική με τη μέθοδο FOM:) Το διάνυσμα υπολοίπου για την προσεγγιστική λύση του FOM δίνεται από τη σχέση

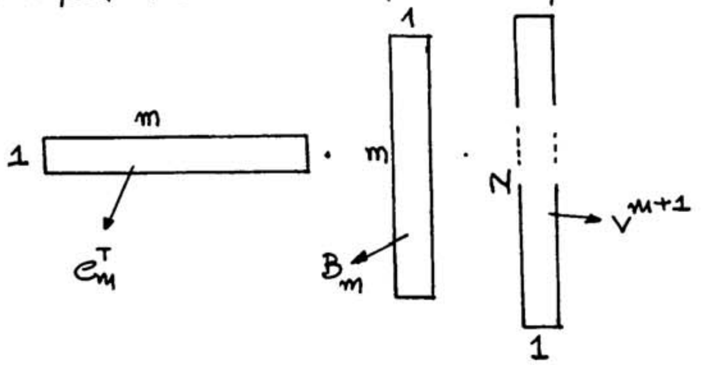
$$b - Ax^m = -h_{m+1,m}\, e_m^T B_m v^{m+1} \qquad (1)$$

και έχει νόρμα:

$$\| b - Ax^m \|_2 = h_{m+1,m} \left| e_m^T B_m \right|$$

Διευκρινήσεις:

Στη σχέση (1) το αριστερό μέλος είναι ένα διάνυσμα στήλης διάστασης N. Στην ίδια σχέση, πλην του βαθμωτού $h_{m+1,m}$, στο δεξί μέλος εκτελείται ο πολλαπλασιασμός που δίνεται σχηματικά παρακάτω:



Απόδειξη:

Είναι: $b - Ax^m = b - A(x^0 + \vartheta^m B_m) = r^0 - A\vartheta^m B_m$

Με τη βοήθεια της πρότασης Π1, γίνεται

$$b - Ax^m = r^0 - \left(\vartheta^m H_m + w^m e_m^T\right) B_m =$$

$$= \|r^0\|_2 v^1 - \vartheta^m H_m B_m - w^m e_m^T B_m =$$

$$= \|r^0\|_2 v^1 - \vartheta^m H_m B_m - h_{m+1,m}\, e_m^T B_m v^{m+1}$$

αφού $w^m = h_{m+1,m} v^{m+1}$. Είναι όμως εξ ορισμού $H_m B_m = \|r^0\|_2 e_1$ οπότε οι δύο πρώτοι όροι απαλείφονται ($\|r^0\|_2 v^1 = \vartheta^m H_m B_m$) και απομένει η (1)!

Η GMRES με επανεκκίνηση (Restarted GMRES)

Με γνωστό τόν αλγόριθμο Arnoldi, ο αλγόριθμος της Restarted GMRES δίνεται παρακάτω. Ο αλγόριθμος αυτός δείχνει τόν τρόπο με τόν οποίο υπολογίζεται μιά νέα προσέγγιση x^m (έχοντας επιλέξει τή διάσταση τής βάσης του υπόχωρου Krylov m) όταν γνωρίζουμε τήν προηγούμενη x^0. Ο αλγόριθμος που ακολουθεί ενσωματώνεται στό γενικό επαναληπτικό βρόχο (με μετρητή (n) τόν αριθμό τών επαναλήψεων). Δηλαδή, με γνωστή τήν $(n-1)$ επανάληψη (γνωστό το $x^{(n-1)}$), θέτουμε $x^0 \leftarrow x^{(n-1)}$ καί ο αλγόριθμος υπολογίζει τό x^m πού ουσιαστικά αποτελεί στό $x^m \longrightarrow x^{(n)}$, κ.ο.κ μέχρι σύγκλισης.

ΒΗΜΑ 1 : Υπολογισμός $r^0 = b - Ax^0$, $v^1 = \dfrac{r^0}{\|r^0\|_2}$

ΒΗΜΑ 2 : Υπολογισμός m-1 (ουσιαστικά όμως m) διανυσμάτων βάσης $v^2, v^3, \dots, v^m$ (ουσιαστικά όμως καί του v^{m+1}) ως εξής:

FOR $j = 1, 2, \dots, m$

υπολογισμός του $w^j = Av^j$

FOR $i = 1, 2, \dots, j$

$$h_{i,j} = (w^j, v^i)$$

END

$$v^{j+1} = w^j - \sum_{i=1}^{j} h_{i,j} v^i$$

$$h_{j+1,j} = \| v^{j+1} \|_2$$

Κανονικοποίηση του v^{j+1} : $v^{j+1} = \dfrac{v^{j+1}}{h_{j+1,j}}$

END

ΒΗΜΑ 3 : Υπολογισμός, μέσω επίλυσης ενός "μικρού" προβλήματος ελαχιστοποίησης, τών m συντελεστών $\beta_1, \dots, \beta_m$ καί δημιουργία τής προσεγγιστικής λύσης

$$x^m = x^0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i v^i$$

Παρατηρήσεις :

• Αποτελεσμα της Restarted GMRES είναι, αν ή βάση που επιλέχθηκε είναι m, νά δημιουργηθεί το Hessenberg μητρώο $\overline{H}_m$, διαστασης $(m+1 \times m)$

Η μορφή του θα είναι:

(πχ, γιά $m=5$)

$$\overline{H}_5 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ \cdot & \times & \times & \times & \times \\ \cdot & \cdot & \times & \times & \times \\ \cdot & \cdot & \cdot & \times & \times \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \times \end{bmatrix}$$

$(\times)$ = μή-μηδενικά

$(\cdot)$ = μηδενικά

• Είναι πρακτικά ευκολο νά δείξει κανείς (και νά κατανοήσει!) τόν τρόπο πού υπολογίζονται οι συντελεστές $h_{i,j}$. Λ.χ. ό συντελεστής $h_{1,2}$ προκύπτει ως

$$h_{1,2} = (w^2, v^1) = (Av^2, v^1)$$

γιατί ετσι εξασφαλίζεται ή "καθετότητα" των v^1 και v^3. Αποδειξη:

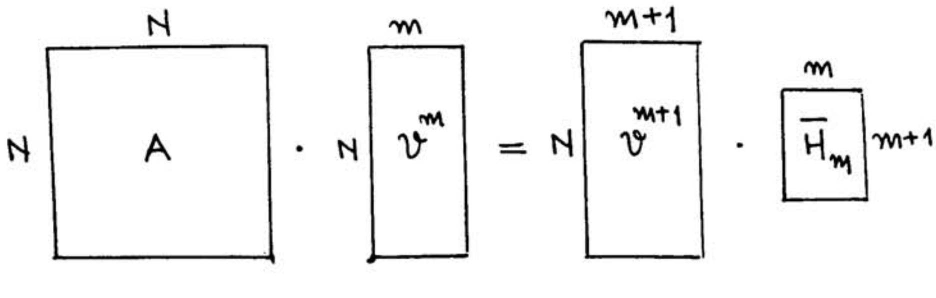
$$(v^3, v^1) = (Av^2 - h_{1,2}v^1 - h_{2,2}v^2, v^1) = (Av^2, v^1) - h_{1,2}(v^1, v^1) - h_{2,2}(v^2, v^1)$$

οπου γνωρίζουμε οτι $(v^1, v^1) = 1$, $(v^2, v^1) = 0$ καί επιθυμουμε $(v^3, v^1) = 0$!

• Υπενθυμίζεται οτι λόγω τού αλγοριθμου Arnoldi πού χρησιμοποιήθηκε γιά νά δημιουργηθεί ή βάση $(v^1, v^2, \dots, v^m)$, ισχύει πάλι ή πρόταση Π1. Είναι δηλαδή:

$$A v^m = v^{m+1}\,\overline{H}_m \qquad \text{(Πρόταση Π1)}$$

Σχηματική παράσταση τής πρότασης Π1:



Προσέξτε ότι το μητρώο $\mathcal{V}^m$ έχει m στήλες πού κατά σειρά είναι τα $(v^1, v^2, \dots, v^m)$ καί τό μητρώο $\mathcal{V}^{m+1}$ έχει τις ίδιες πρώτες m στήλες και ως $(m+1)$-ιοστή στήλη τό διάνυσμα v^{m+1}.

• Καταλάβετε τί σημαίνει πρακτικά ή πρόταση Π1! Γιά νά γίνει αυτό, ας εκφράσουμε λ.χ. τά Av^1 και Av^2, εκτελώντας επιμέρους πολλαπλασιασμούς (χρησιμοποιώντας επιλεκτικά στήλες του $\mathcal{V}^m$). Είναι:

$$Av^1 = \|v^2\|_2 v^2 + h_{1,1} v^1 = h_{2,1} v^2 + h_{1,1} v^1$$

$$Av^2 = \|v^3\|_2 v^3 + h_{1,2} v^1 + h_{2,2} v^2 = h_{3,2} v^3 + h_{2,2} v^2 + h_{1,2} v^1$$

Γενικεύοντας, γιά κάθε k (καί προφανώς καί γιά $k=m$) ισχύει

$$Av^k = \sum_{i=1}^{k+1} h_{i,k} v^i$$

Ρόλος - Υπολογισμός τών Συντελεστών β_i

"Κτίζοντας" τή νέα προσεγγιστική λύση ως $x^m = x^0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i v^i$, θά απαιτήσουμε τό υπόλοιπο r^m τού x^m νά έχει ελάχιστη τιμή νόρμας-2.

Απαιτούμε λοιπόν

$$\min \| Ax^m - b \|_2 = \min \| Ax^0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i A v^i - b \|_2 = \min \| r^0 - \sum_{i=1}^{m} \beta_i A v^i \|_2$$

Θυμίζουμε οτι οί m συντελεστές β_i, $i=1,m$ είναι τά στοιχεία ενός διανύσματος στήλης (διάστασης $m \times 1$) πού ήδη συμβολίσαμε μέ B_m. Η τελευταία σχέση πού προέκυψε προηγούμενα γράφεται σε μητρωϊκή μορφή ως

$$\min \| r^0 - (A\vartheta^m) B_m \|_2$$

Από τήν πρόταση Π1 έχουμε οτι $A\vartheta^m = \vartheta^{m+1} \overline{H}_m$, άρα απαιτούμε:

$$\min \| r^0 - \vartheta^{m+1} \overline{H}_m B_m \|_2$$

Γράφουμε, εξ ορισμού, τό r^0 ως $r^0 = \|r^0\|_2 v^1$, τό δέ v^1 τό εκφράζουμε ως $v^1 = \vartheta^{m+1} e_1$

οπου e_1 είναι ή πρώτη στήλη τού ταυτοτικού μητρώου I, διάστασης $(m+1 \times m+1)$

Συνεπώς, τελικά απαιτούμε νά ισχύει:

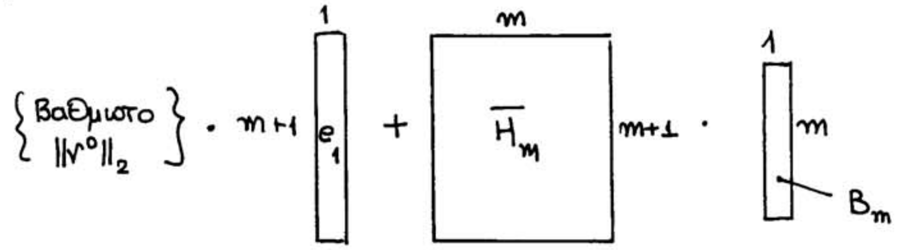
$$\min \| \|r^0\|_2 \vartheta^{m+1} e_1 - \vartheta^{m+1} \overline{H}_m B_m \|_2 = \min \| \vartheta^{m+1} \{ \|r^0\|_2 e_1 - \overline{H}_m B_m \} \|_2$$

Επειδή τά διανύσματα στήλης πού συνθέτουν τό ϑ^{m+1} είναι ανεξάρτητα τών β_i , απαιτούμε ουσιαστικά τή συνθήκη:

$$\min \| \|r^0\|_2 e_1 - \overline{H}_m B_m \|_2 \qquad (1)$$

πού (γενικά!) επιτρέπει τόν υπολογισμό τών $(\beta_1, \ldots, \beta_m)$ μέ τήν ικανοποίηση της.

Σχηματική Απεικόνιση της Συνθήκης (1):



Πρόκειται για $(m+1)$ εξισώσεις πού πρέπει νά ικανοποιηθούν έχοντας γιά αγνώστους (m) (μόνο!) ποσότητες $(\beta_1, \dots, \beta_m)$. Τό πρόβλημα αντιμετωπίζεται μέ τήν τεχνική τών ελαχίστων τετραγώνων (Least Squares Problem)

<u>Πρακτικά:</u>

Θεωρείστε μητρώα στροφής F_i, όπως λ.χ. τά παρακάτω:

$$F_1 \equiv \begin{bmatrix} c_1 & -s_1 & 0 & 0 & \\ s_1 & c_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \\ & & \vdots & & \end{bmatrix}, \quad F_2 \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & c_2 & -s_2 & 0 & \cdots \\ 0 & s_2 & c_2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \\ & & \vdots & & \end{bmatrix}$$

Όλα είναι διάστασης $(m+1 \times m+1)$ καί μέ τόν τρόπο αυτό μπορούν νά κατασκευαστούν m τέτοια μητρώα στροφής, τά $F_1, F_2, \dots, F_m$.

Σύμβολα όπως τά (c_1, s_1) ή (c_2, s_2) κ.ο.κ. αντιστοιχούν σέ κατάλληλα επιλεγμένα συνημίτονα (c) ή ημίτονα (s) τής 'υποτιθέμενης γωνίας στροφής'.

Εφαρμόζοντας λ.χ. τό F_1 στό $\overline{H}_m$ μπορεί νά απαλειφθεί τό $h_{2,1}$ (δηλ. τό κάτω τής διαγωνίου στοιχείο τής πρώτης στήλης), αφού τά c_1, s_1 νά υπολογισθούν κατάλληλα (πως; με τή στροφή F_1 ποια άλλα στοιχεία του $\overline{H}_m$ αλλάζουν;)

Μέ m εν σειρά εφαρμογές τών τελεστών στροφής $F_1, F_2, \dots, F_m$ στό μητρώο $\overline{H}_m$ μπορεί να προκύψει ενας $(m \times m)$ ανω τριγωνικός πίνακας H_m^*. (ειναι $(m+1 \times m)$ αλλά ή τελευταία γραμμή είναι "όλο μηδενικά"). Συμβολικά:

$$(F_m \cdot F_{m-1} \cdots F_1)\, \overline{H}_m = \overline{H}_m^*$$

Οί m διαδοχικές στροφες μπορούν να συναθροιστούν στήν τελεση Q καί ειναι:

$$Q\, \overline{H}_m = \overline{H}_m^*$$

οπου δείχνεται ευκολα οτι ισχυει : $Q^H Q = I$

$(Q^H =$ transpose conjugate : $Q^H = \overline{Q}^T = \overline{Q^T}\ )$

Η ελαχιστοποίηση διατυπωνεται τότε ως

$$\min \ \| \overline{g}_m - \overline{H}_m^* B_m \|_2 \qquad (2)$$

οπου

$$\overline{g}_m = Q\, \|v^0\|_2\, e_1 = (\gamma_1, \gamma_2, \cdots, \gamma_{m+1})^T$$

Η ελαχιστοποίηση πού εκφράζει ή σχέση (2) περιορίζεται στήν επίλυση ενός $(m \times m)$ γραμμικού προβλήματος με αγνωστους τά $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$.
Η επίλυση είναι απλή, αφού τό μητρώο τών συντελεστών είναι ενα τριγωνικο (απαιτείται μόνο μια πίσω αντικατάσταση). Απλά λοιπόν λύνουμε τό σύστημα

$$H_m^* B_m = g_m$$

οπου ας θεωρήσουμε οτι τό H_m^* είναι ενα $(m \times m)$ μητρώο που προκύπτει από τό $\overline{H}_m^*$ απαλείφοντας τή (μηδενική) τελευταία γραμμή του, ενω

$$g_m = (\gamma_1, \gamma_2, \cdots, \gamma_m)^T$$

Πρόταση Π3:

Ισχύει (και είναι πρακτικά ιδιαίτερα χρήσιμο όταν προγραμματίζουμε GMRES)

ότι:
$$\gamma_{m+1} = \left\| \, \|r^0\|_2 e_1 + \overline{H}_m B_m \right\|_2$$

Απόδειξη:

Με τον υπολογισμό της προσεγγιστικής λύσης x^m, το αντίστοιχο υπόλοιπο γίνεται:
$$r^m = b - Ax^m = b - A(x^0 + v^m B_m) = r^0 - Av^m B_m =$$
$$= r^0 - v^{m+1}\overline{H}_m B_m = \|r^0\|_2 v^{m+1} e_1 - v^{m+1}\overline{H}_m B_m =$$
$$= v^{m+1}\left\{ \|r^0\|_2 e_1 - \overline{H}_m B_m \right\}$$
οπου χρησιμοποιήθηκε και η πρόταση Π1. Επειδη $Q^T Q = I$ γραφουμε:
$$r^m = v^{m+1} Q^T Q \left\{ \|r^0\|_2 e_1 - \overline{H}_m B_m \right\} =$$
$$= v^{m+1} Q^T \left\{ \overline{g}_m - \overline{H}^*_m B_m \right\}$$

Στο προβλημα ελαχιστοποίησης επελεξα νά λύσω την $H^*_m B_m = g_m$ πού πρακτικά απαλείφει καθε συνιστώσα του $\overline{g}_m = (\gamma_1, \gamma_2, \cdots, \gamma_{m+1})^T$ εκτός από την τελευταία (τη γ_{m+1}). Άρα
$$r^m = b - Ax^m = v^{m+1} Q^T \left(\gamma_{m+1} e_{m+1} \right)$$

Εκμεταλλευομενα ομως οτι η βάση που δημιουργήσαμε είναι ορθοκανονική προκύπτει εύκολα οτι $v^{m+1} Q^T = I$ και ετσι
$$\|r^m\|_2 = \| b - Ax^m \|_2 = \gamma_{m+1} \quad , \text{ο.ε.δ.}$$

Η GMRES με επανεκκίνηση και προδιάθεση (Preconditioned Restarted GMRES)

Ενα M είναι ο προδιαθέτης, οι αλλαγές που απαιτούνται στον αλγόριθμο που προηγουμενα δοθηκε για τη Restarted GMRES είναι οι εξής:

(α) στο ΒΗΜΑ 1: πρέπει να υπολογισθεί το υπολοιπο της προδιάθεσης (preconditioned residual) ως

$$r^0 = M^{-1}(b - Ax^0) \quad , \text{ή αλλοιώς} \quad M\, r^0 = b - Ax^0$$

και επίσης να κανονικοποιηθεί ως $\quad v^1 = \dfrac{r^0}{\|r^0\|_2}$

(β) στο ΒΗΜΑ 2: να χρησιμοποιείται $(\forall j)$ η ποσοτητα

$$w^j = M^{-1} A v^j$$

πού ουσιαστικά απαιτεί τη "λύση" του συστηματος

$$M w^j = A v^j$$

Παρατηρηση: Το πόσο επιπλέον "στοιχίζουν" οι πράξεις με το μητρωο M καθορίζουν και το αν "αξίζει" ή οχι να χρησιμοποιείται ο προδιαθέτης που διαλεξαμε.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΕΣ ΑΝΑΦΟΡΕΣ

Σχετικά με τη μέθοδο του GMRES, αλλά και του Preconditioned GMRES, συνιστώνται τα βιβλία-reports-papers:

- "Iterative Methods for Sparse Linear Systems", by Yousef Saad.
- Y. Saad – M.H. Schultz: "Parallel Implementations of preconditioned conjugate gradient methods", Yale Univ., Rep. 425, 1985
- Y. Saad – M.H. Schultz: "GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for solving non-symmetric linear systems", Yale Univ, Rep. 254, 1983

Περαιτέρω πληροφορία μπορεί να αναζητηθεί και διαδικτυακά. Ξεκινήστε λ.χ. από το site του Prof. Yousef Saad (Univ. of Minnesota, Dept. Comp. Science and Engineering) http://www-users.cs.umn.edu/~saad/ , όπου πολλά σχετικά reports μπορούν να ανακτηθούν από το εκεί ftp site

ΘΕΜΑΤΑ ΓΙΑ ΠΕΡΑΙΤΕΡΩ ΕΜΒΑΘΥΝΣΗ

Το να ασχολείται κανείς με το GMRES σημαίνει πρακτικά ότι πρέπει να ξεπεράσει τη βασική γνωριμία που επιχειρήσαμε εδώ και να αναζητήσει να εμβαθύνει σε θέματα όπως:

- Βέλτιστη χρήση του προδιαθέτη-προσταθεροποιητή (preconditioner), ανάλογα πάντοτε με το πρόβλημα που επιλύεται.
- Αριθμητική διαχείριση της διαδικασίας Arnoldi για αποφυγή προβλημάτων όπως είναι το breakdown (λίγα πράγματα αναφέρονται κατά τη διδασκαλία).
- Μεταφορά του preconditioned GMRES σε παράλληλους υπολογιστές, κυρίως κατανεμημένης μνήμης (λχ. clusters PC).
- Το μη-γραμμικό GMRES (Non-linear GMRES) για την επίλυση της μη-γραμμικής εξίσωσης $F(x)=0$.