

Επιστημονικοί Υπολογισμοί

3.6.1 Μέθοδοι μεταβλητής παρεκτροπής (Variable Extrapolation)

Πανεπιστήμιο Αθηνών

18 Απριλίου 2024

Μέθοδοι μεταβλητής παρεκτροπής (Variable Extrapolation)

Στην ημι-επαναληπτική μέθοδο Chebyshev κάθε διάνυσμα $\mathbf{v}^{(n+1)}$ απαιτεί τον υπολογισμό των δύο προηγούμενων διανυσματων $\mathbf{v}^{(n)}$ και $\mathbf{v}^{(n-1)}$.

Αν ο υπολογιστής είναι περιορισμένης χωρητικότητας μνήμης, τότε μπορούμε να θεωρήσουμε έναν άλλο τύπο για την επιτάχυνση της βασικής ε.μ.

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{G}\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{k}.$$

Ιδέα του Richardson(1910): Μεταβλητή παράμετρος $\bar{\rho}$ στην επιταχυντική μορφή της βασικής επαναληπτικής μεθόδου

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \bar{\rho}(\mathbf{G}\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{k}) + (1 - \bar{\rho})\mathbf{u}^{(n)} \quad (1)$$

Ετσι παράγεται η νέα επιταχυντική μορφή

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \theta_{n+1}(\mathbf{G}\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{k}) + (1 - \theta_{n+1})\mathbf{u}^{(n)}, \quad (2)$$

όπου $\theta_1, \theta_2, \dots$ είναι οι παράμετροι επανάληψης.

Οι παράμετροι επανάληψης θ_k

Οι παράμετροι επανάληψης θ_n επιλέγονται με την κυκλική σειρά $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m, \theta_1, \theta_2, \dots$ όπου m είναι ακέραιος.

Συνεπώς για δεδομένα $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m$ έχουμε

$$\mathbf{u}^{(m)} = \mathbf{P}_m(\mathbf{G})\mathbf{u}^{(0)} + \mathbf{k}_m \quad (3)$$

για ένα κατάλληλο διάνυσμα \mathbf{k}_m και το $\mathbf{P}_m(\mathbf{G})$ είναι το πολυώνυμο

$$\mathbf{P}_m(\mathbf{G}) = \prod_{k=1}^m (\theta_k \mathbf{G} + (1 - \theta_k) \mathbf{I}) \quad (4)$$

Ακολουθώντας την ανάλυση της προηγούμενης παραγράφου συμπεραίνεται ότι το ελαχιστοποιημένο πολυώνυμο $\mathbf{P}_m(\mathbf{m})$ δίνεται από τον τύπο

$$\mathbf{P}_m(\mu) = \frac{\mathbf{T}_m\left(\frac{2\mu - (\mathbf{b} + \mathbf{a})}{\mathbf{b} - \mathbf{a}}\right)}{\mathbf{T}_m\left(\frac{2 - (\mathbf{b} + \mathbf{a})}{\mathbf{b} - \mathbf{a}}\right)}. \quad (5)$$

Προσδιορισμός των παραμέτρων επανάληψης θ_k

Εξισώνοντας τις ρίζες των (4) και (5) οι τιμές των παραμέτρων θ_k προκύπτουν από τον τύπο

$$\theta_k = \frac{2}{2 - (\mathbf{b} - \mathbf{a}) \operatorname{csc} \frac{(2k-1)\pi}{2m} - (\mathbf{b} + \mathbf{a})}, \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (6)$$

Η ιδεατή φασματική ακτίνα μπορεί να επαληθευθεί ότι είναι

$$\bar{\mathbf{s}}(\mathbf{P}_{\mathbf{m}}(\mathbf{G})) = \left(\frac{2r^{m/2}}{1 + r^m} \right)^l \quad (7)$$

όπου l είναι ένας ακέραιος που προσδιορίζει τον αριθμό των κύκλων.

Παρατηρήσεις

- Μπορεί να διαπιστωθεί, ότι καθώς το m αυξάνει, η ταχύτητα σύγκλισης τείνει σε αυτήν της ημιεπαναληπτικής μεθόδου.
- Όμως, τα πειραματικά αποτελέσματα (Young(1954a,1956), Young και Warlick(1953)) δείχνουν ότι για μεγάλα m ενδέχεται να παρατηρηθεί αριθμητική αστάθεια.
- Επίσης, δεν είναι επιθυμητό να επιλεγεί το m πολύ μεγάλο επειδή η σύγκλιση αναμένεται μετά από lm επαναλήψεις.

3.6.2 Μέθοδοι 2ου-βαθμού (Second-Degree) (SD)

Αν θεωρήσουμε σταθερές παραμέτρους επανάληψης στην ημι-επαναληπτική μέθοδο

$$\mathbf{v}^{(n+1)} = \rho_{n+1} \left(\bar{\rho}(\mathbf{G}\mathbf{v}^{(n)} + \mathbf{k}) + (1 - \bar{\rho})\mathbf{v}^{(n)} \right) + (1 - \rho_{n+1})\mathbf{v}^{(n-1)} \quad (8)$$

πιο συγκεκριμένα, αν την εκφράσουμε στην ισοδύναμη μορφή (όπου \mathbf{v} θέτουμε \mathbf{u})

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{u}^{(n)} + (\rho_{n+1} - 1) \left(\mathbf{u}^{(n)} - \mathbf{u}^{(n-1)} \right) + \frac{2\rho_{n+1}}{2 - (\mathbf{a} + \mathbf{b})} \left(\mathbf{G}\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{k} - \mathbf{u}^{(n)} \right) \quad (9)$$

και θέσουμε $\xi = \rho_{n+1} - 1$ και $\eta = \frac{2\rho_{n+1}}{2 - (\mathbf{a} + \mathbf{b})}$, τότε προκύπτει η επαναληπτική μέθοδος **δευτέρου βαθμού (Second-Degree)**

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{u}^{(n)} + \xi \left(\mathbf{u}^{(n)} - \mathbf{u}^{(n-1)} \right) + \eta \left(\mathbf{G}\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{k} - \mathbf{u}^{(n)} \right) \quad (10)$$

Μέθοδοι 2ου-βαθμού (Second-Degree)(SD)

Η μορφή της μεθόδου **SD** είναι μια ειδική περίπτωση της γραμμικής στατικής επαναληπτικής μεθόδου δευτέρου βαθμού που δίνεται ως εξής

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{G}_1 \mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{H}_1 \mathbf{u}^{(n-1)} + \mathbf{k}_1 \quad (11)$$

Στη συνέχεια (βλ. Golub και Varga(1961)) η ανωτέρω ε.μ. μπορεί να γραφεί ως εξής

$$\begin{bmatrix} \mathbf{u}^{(n)} \\ \mathbf{u}^{(n+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{I} \\ \mathbf{H}_1 & \mathbf{G}_1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{(n-1)} \\ \mathbf{u}^{(n)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{O} \\ \mathbf{k}_1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

Η επαναληπτική μέθοδος συγκλίνει αν και μόνο αν

$$\mathbf{s}(\mathbf{M}) < 1 \quad (13)$$

όπου

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{O} & \mathbf{I} \\ \mathbf{H}_1 & \mathbf{G}_1 \end{bmatrix} \quad (14)$$

...Μέθοδοι 2ου-βαθμού (Second-Degree) (SD)...

Έτσι λοιπόν, αν λ είναι μια ιδιοτιμή του \mathbf{M} , τότε οι ρίζες της εξίσωσης

$$\det(\lambda^2 \mathbf{I} - \lambda \mathbf{G}_1 - \mathbf{H}_1) = 0 \quad (15)$$

πρέπει να είναι μικρότερες της μονάδας, έτσι ώστε να συγκλίνει η ε.μ., τότε έχουμε

$$\det(\lambda^2 \mathbf{I} - \lambda(\eta \mathbf{G} + (\mathbf{1} - \eta + \xi) \mathbf{I}) + \xi \mathbf{I}) = 0, \quad (16)$$

οπότε αν μ είναι μια ιδιοτιμή του \mathbf{G} , τότε ισχύει

$$\lambda^2 - \lambda(\eta\mu + \mathbf{1} - \eta + \xi) + \xi = 0. \quad (17)$$

Για σταθερό ξ η φασματική ακτίνα, που είναι $\eta \max_{\mu} |\lambda|$, ελαχιστοποιείται όταν

$$(\eta\mu + \mathbf{1} - \eta + \xi)^2 = 4\xi \quad (18)$$

...Μέθοδοι 2ου-βαθμού (Second-Degree)(SD)...

Έτσι έχουμε ότι

$$\eta(\beta - 1) + 1 + \xi = 2\xi^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

και

$$\eta(\alpha - 1) + 1 + \xi = -2\xi^{\frac{1}{2}} \quad (20)$$

Συνεπώς, με πρόσθεση κατά μέλη μπορεί να προσδιοριστεί το η από την σχέση

$$\eta = \frac{2(1 + \xi)}{2 - (\beta + \alpha)} \quad (21)$$

Επιπλέον, προκύπτει ότι η καλύτερη εκλογή για το ξ είναι η ακόλουθη

$$\xi_0 = \hat{\omega}_0 - 1 \quad (22)$$

όπου

$$\hat{\omega}_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \sigma^2}} \quad (23)$$

και σ όπως ορίζεται προηγουμένως.

Τελικά, η καλύτερη τιμή του η προκύπτει από την έκφραση

$$\eta_0 = \frac{2\hat{\omega}_0}{2 - (\beta + \alpha)} \quad (24)$$

...Μέθοδοι 2ου-βαθμού (Second-Degree)(SD)

Λαμβάνοντας υπόψη ότι η φασματική ακτίνα του M δίνεται ως εξής

$$\mathbf{S}(M) = (\omega_0 - 1)^{\frac{1}{2}} = r^{\frac{1}{2}}, \quad (25)$$

οπότε η ταχύτητα σύγκλισης είναι

$$\mathbf{R}(M) = -\frac{1}{2} \log r \quad (26)$$

η οποία είναι συγκρίσιμη με εκείνη που προκύπτει για τις ημιεπαναληπτικές τεχνικές. Επίσης, έχουμε

$$\mathbf{R}_n(\mathbf{P}_n(\mathbf{G})) = \frac{1}{n} \log \mathbf{S}(\mathbf{P}_n(\mathbf{G})) = -\frac{1}{2} \tau - \frac{1}{n} \log \left(\frac{2}{1 + \tau^n} \right)$$

όπου

$$\tau = \frac{1 - \sqrt{1 - \sigma^2}}{1 + \sqrt{1 + \sigma^2}}$$

συμπεραίνουμε ότι η ταχύτητα σύγκλισης της ημιεπαναληπτικής και της μεθόδου δευτέρου βαθμού εξαρτάται από την ποσότητα r .

Σύγκριση των μεθόδων 2ου-βαθμού (Second-Degree)(SD) με τις ημι-επαναληπτικές

- Έχει αποδειχθεί (βλ. Young και Kincaid (1969)) ότι η ημιεπαναληπτική μέθοδος παρουσιάζει μεγαλύτερη επιτάχυνση από την μέθοδο δευτέρου βαθμού. Αυτό άλλωστε αναμένεται, διότι οι συντελεστές στην μέθοδο δευτέρου βαθμού είναι σταθεροί, ενώ στην ημιεπαναληπτική μέθοδο είναι μεταβλητές.
- Όμως, στις ημιεπαναληπτικές μεθόδους, χρειάζεται να αποθηκεύονται δύο διανύσματα στην κάθε επανάληψη και συνεπώς η απαίτηση για αποθήκευση μπορεί να είναι κρίσιμη για μεγάλα συστήματα εξισώσεων ή σε υπολογιστές με περιορισμένη χωρητικότητα μνήμης.

3.6.3 Η μέθοδος των συζυγών κατευθύνσεων (Conjugate Gradient(CG))

Έχει προταθεί αρχικά από τους Hestenes και Stiefel (1952), Stiefel(1952) ως μια επαναληπτική μέθοδος για την επίλυση μεγάλων αραιών γραμμικών συστημάτων (Reid(1971)).

Έστω το γραμμικό σύστημα

$$\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{b} \quad (27)$$

όπου \mathbf{A} είναι ένας $\mathbf{N} \times \mathbf{N}$ συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας.

Η μέθοδος (Conjugate Gradient(CG)) στηρίζεται στο γνωστό αποτέλεσμα βελτιστοποίησης του Luenberger(1973).

Θεώρημα

Αν ο $n \times n$ πίνακας \mathbf{A} είναι πραγματικός **συμμετρικός** και **θετικά ορισμένος** τότε η επίλυση του γραμμικού συστήματος $\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{b}$ είναι ισοδύναμη με την ελαχιστοποίηση της τετραγωνικής συνάρτησης

$$\mathbf{Q}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2}(\mathbf{u}, \mathbf{A}\mathbf{u}) - (\mathbf{u}, \mathbf{b}) \quad (28)$$

Επίσης η συνάρτηση $\mathbf{Q}(\mathbf{u})$ για $\mathbf{u} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ έχει ελάχιστη τιμή $\frac{1}{2}(\mathbf{b}, \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b})$.

Η μέθοδος των συζυγών κατευθύνσεων (CG)

Η τετραγωνική συνάρτηση ορίζει μια οικογένεια ομοίων ελλειψοειδών στον N -διάστατο Ευκλείδειο χώρο, τα οποία έχουν κοινό κέντρο το $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$, σημείο στο οποίο η $\mathbf{Q}(\mathbf{u})$ παίρνει την ελάχιστη τιμή της.

Για ένα αυθαίρετο διάνυσμα $\mathbf{u}^{(n)}$, το υπόλοιπο $\mathbf{r}^{(n)}$ δίνεται από τον τύπο

$$\mathbf{r}^{(n)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{u}^{(n)} = - [\mathbf{Grad} \mathbf{Q}(\mathbf{u})]^1 \mathbf{u}^{(n)} \quad (29)$$

και αυτό είναι πάντοτε κάθετο προς την επιφάνεια του ελλειψοειδούς που ορίζεται από την (28).

όπου $[\mathbf{Grad} \mathbf{Q}(\mathbf{u})]^1 \mathbf{u}^{(n)}$ αναπαριστά ένα διάνυσμα με συνιστώσες $\frac{\partial \mathbf{Q}(\mathbf{u}^{(n)})}{\partial u_i}$, $i = 1, 2, \dots, n$

Έτσι λοιπόν, επιδιώκουμε να φθάσουμε στη λύση $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$, δηλαδή στο κέντρο του ελλειψοειδούς, με μια ακολουθία διανυσμάτων μετατόπισης της μορφής

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{u}^{(n)} + \epsilon_n \mathbf{p}^{(n)} \quad (30)$$

όπου $\mathbf{p}^{(n)}$ είναι μια αυθαίρετη κατεύθυνση και ϵ_n είναι μια αυθαίρετη σταθερά.

Το πρόβλημα λοιπόν ανάγεται στο να προσδιοριστούν τα ϵ_n έτσι ώστε η τετραγωνική συνάρτηση $\mathbf{Q}(\mathbf{u}^{(n+1)})$ να ελαχιστοποιείται για μια δοθείσα κατεύθυνση $\mathbf{p}^{(n)}$. Έτσι έχουμε ότι η $\mathbf{Q}(\mathbf{u}^{(n+1)})$ δίνεται από τον τύπο

$$\mathbf{Q}(\mathbf{u}^{(n+1)}) = \frac{1}{2} \left((\mathbf{u}^{(n)} + \epsilon_n \mathbf{p}^{(n)}), \mathbf{A}(\mathbf{u}^{(n)} + \epsilon_n \mathbf{p}^{(n)}) \right) - \left((\mathbf{u}^{(n)} + \epsilon_n \mathbf{p}^{(n)}), \mathbf{b} \right) \quad (31)$$

όπου

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{Q}(\mathbf{u}^{(n+1)})}{\partial \epsilon_n} &= \left(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{A}(\mathbf{u}^{(n)} + \epsilon_n \mathbf{p}^{(n)}) \right) - \left(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{b} \right) \\ &= -\left(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)} \right) + \left(\epsilon_n \mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{A} \mathbf{p}^{(n)} \right). \end{aligned} \quad (32)$$

Η βέλτιστη τιμή του ϵ_n προκύπτει θέτοντας την προηγούμενη έκφραση ίση με μηδέν, οπότε άμεσα προκύπτει

$$\epsilon_n = \frac{(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)})}{(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(n)})}. \quad (33)$$

Επίσης, με τη χρήση του ορισμού του $\mathbf{u}^{(n+1)}$ στην (30) και της τιμής που προέκυψε για το ϵ_n , έχουμε

$$(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n+1)}) = (\mathbf{p}^{(n)}, (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{u}^{(n+1)})) = (\mathbf{p}^{(n)}, (\mathbf{r}^{(n)} - \epsilon_n \mathbf{A}\mathbf{p}^{(n)})) = 0 \quad (34)$$

που σημαίνει ότι η διεύθυνση $\mathbf{p}^{(n)}$ και το υπόλοιπο $\mathbf{r}^{(n+1)}$ είναι ορθογώνια.

- Η εκλογή του διανύσματος κατεύθυνσης $\mathbf{p}^{(n)}$ διαφοροποιεί πολλές μεθόδους, οι οποίες συγκλίνουν για ένα δοθέν $\mathbf{p}^{(n)}$.
- Αν θέλουμε να επιλέξουμε το $\mathbf{p}^{(n)}$ να βρίσκεται κατά μήκος της γραμμής της απότομης καθόδου(ή μείωσης) steepest descent, τότε απλά παίρνουμε $\mathbf{p}^{(n)} = \mathbf{r}^{(n)}$ και από τις (30) και (33) άμεσα ορίζουμε την γνωστή μέθοδο **Steepest Descent** η οποία όμως σε πολλές περιπτώσεις παρουσιάζει μια πολύ αργή σύγκλιση.
- Μια καλύτερη στρατηγική για την εκλογή της διεύθυνσης $\mathbf{p}^{(n)}$ βασίζεται στο ότι το κέντρο του ελλεισοειδούς βρίσκεται πάνω στο επίπεδο το συζυγές ως προς μια δοθείσα χορδή.

Έτσι, αν εκλέξουμε τα διανύσματα $\mathbf{p}^{(0)}, \mathbf{p}^{(1)}, \dots, \mathbf{p}^{(N-1)}$ να είναι ανά δύο συζυγή, δηλαδή να ισχύει

$$(\mathbf{p}^{(i)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(i)}) = 0 \quad (35)$$

για $i \neq j$, τότε με τον προσδιορισμό του $\mathbf{p}^{(n+1)}$ από τον τύπο

$$\mathbf{p}^{(n)} = \mathbf{r}^{(n)} + \alpha_{n-1}\mathbf{p}^{(n-1)} \quad (36)$$

και με συνδυασμό των (35) και (36) προκύπτει

$$(\mathbf{p}^{(n)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(n-1)}) = (\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(n-1)}) + (\alpha_{n-1}\mathbf{p}^{(n-1)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(n-1)}) = 0 \quad (37)$$

και τελικά

$$\alpha_{n-1} = \frac{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(n-1)})}{(\mathbf{p}^{(n-1)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(n-1)})} \quad (38)$$

Η μέθοδος **Conjugate Gradient (CG)**

Η εκλογή αυτή του $p^{(n)}$ μας οδηγεί στο επαναληπτικό σχήμα της μεθόδου **Conjugate Gradient (CG)**, που ορίζεται ως ακολούθως

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \mathbf{u}^{(n)} + \epsilon_n \mathbf{p}^{(n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, m-1 \quad (39)$$

$$\mathbf{r}^{(n)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{u}^{(n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, m \quad (40)$$

$$\mathbf{p}^{(n)} = \begin{cases} 0 & , \quad n = -1 \\ \mathbf{r}^{(n)} + \alpha_{n-1} \mathbf{p}^{(n-1)} & , \quad n = 0, 1, 2, \dots, m-1 \end{cases} \quad (41)$$

$$\alpha_{n-1} = \begin{cases} 0 & , \quad n = 0 \\ -\frac{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(n-1)})}{(\mathbf{p}^{(n-1)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(n-1)})} & , \quad n = 0, 1, 2, \dots, m-1 \end{cases} \quad (42)$$

όπου m είναι ο μικρότερος ακέραιος τέτοιος ώστε να ισχύει

$$\mathbf{r}^{(m)} = \mathbf{0}. \quad (43)$$

Βασικές ιδιότητες της μεθόδου CG(βλ. Beckmann (1960))

$$(\mathbf{r}^{(i)}, \mathbf{r}^{(j)}) = 0 \quad i \neq j, \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, m-1$$

$$(\mathbf{p}^{(i)}, \mathbf{A}\mathbf{p}^{(j)}) = 0 \quad i \neq j, \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, m-1$$

$$\mathbf{p}^{(i)} \neq \mathbf{0}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, m-1$$

(44)

$$m \leq N$$

και

$$\alpha_{n-1} = \frac{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)})}{(\mathbf{r}^{(n-1)}, \mathbf{r}^{(n-1)})}, \quad n = 1, 2, \dots, m-1$$

Συμπέρασμα-Παρατηρήσεις

- Η επαναληπτική μέθοδος CG συγκλίνει σε N το πολύ επαναλήψεις, όπου N είναι η τάξη του πίνακα A .
- Αν και η μέθοδος CG θεωρητικά δίνει μια ακριβή λύση σε N επαναλήψεις, αυτό δεν συμβαίνει πραγματικά στην πράξη, όπου το σφάλμα στρογγύλευσης επηρεάζει δραστικά την ορθογωνιότητα των υπολοίπων.
- Για το λόγο αυτό έχουν γίνει στην μέθοδο CG κάποιες τροποποιήσεις και βελτιώσεις (βλ. Rutishauer (1959), Daniel (1967), Reid (1971), Axelson(1974) και Evans(1973)).

Τροποποίηση της μεθόδου CG

Είναι η διατύπωσή της ως μιας μεθόδου δευτέρου βαθμού, στην οποία ο όρος $\mathbf{u}^{(n+1)}$ εκφράζεται συναρτήσεως των δύο προηγούμενων του $\mathbf{u}^{(n)}$ και $\mathbf{u}^{(n-1)}$. Αντικαθιστώντας όπου \mathbf{n} το $\mathbf{n} - 1$ στην (39) έχουμε

$$\mathbf{u}^{(n)} = \mathbf{u}^{(n-1)} + \epsilon_{n-1} \mathbf{p}^{(n-1)} \quad (45)$$

ή

$$\frac{\alpha_{n-1}}{\epsilon_{n-1}} \epsilon_n \mathbf{u}^{(n)} = \frac{\alpha_{n-1}}{\epsilon_{n-1}} \epsilon_n \mathbf{u}^{(n-1)} + \epsilon_n \alpha_{n-1} \mathbf{p}^{(n-1)} \quad (46)$$

οπότε με απαλοιφή του $\mathbf{p}^{(n-1)}$ χρησιμοποιώντας την (41) προκύπτει

$$\frac{\alpha_{n-1}}{\epsilon_{n-1}} \epsilon_n \mathbf{u}^{(n)} = \frac{\alpha_{n-1}}{\epsilon_{n-1}} \epsilon_n \mathbf{u}^{(n-1)} + \epsilon_n (\mathbf{p}^{(n)} - \mathbf{r}^{(n)}) \quad (47)$$

και τελικά με απαλοιφή του $\mathbf{p}^{(n)}$ στην (39) προκύπτει

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \left(\mathbf{1} + \frac{\epsilon_n}{\epsilon_{n-1}} \alpha_{n-1} \right) \mathbf{u}^{(n)} - \frac{\epsilon_n}{\epsilon_{n-1}} \alpha_{n-1} \mathbf{u}^{(n-1)} + \epsilon_n \mathbf{r}^{(n)} \quad (48)$$

η οποία μπορεί να γραφεί στη πιό συνεπτυγμένη μορφή

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \rho_{n+1}(\mathbf{u}^{(n)} + \gamma_{n+1}\mathbf{r}^{(n)}) + (\mathbf{1} - \rho_{n+1})\mathbf{u}^{(n-1)} \quad (49)$$

όπου

$$\rho_{n+1} = 1 + \frac{\epsilon_n}{\epsilon_{n-1}}\alpha_{n-1} \quad (50)$$

και

$$\gamma_{n+1} = \frac{\epsilon_n}{\rho_{n+1}} \cdot \quad (51)$$

Στη συνέχεια για την απλοποίηση των εκφράσεων των ρ_{n+1} και γ_{n+1} εκφράζουμε αυτές συναρτήσει ορισμένων εσωτερικών γινομένων. Πιό συγκεκριμένα, εκφράζουμε την (49) συναρτήσει των υπολοίπων με χρήση της (40), οπότε προκύπτει

$$\mathbf{r}^{(n+1)} = \rho_{n+1}(\mathbf{r}^{(n)} - \gamma_{n+1}\mathbf{A}\mathbf{r}^{(n)}) + (\mathbf{1} - \rho_{n+1})\mathbf{r}^{(n-1)} \quad (52)$$

Αν τώρα πάρουμε το εσωτερικό γινόμενο των δύο μελών της (52) με το $\mathbf{r}^{(n)}$, τότε από την (44) προκύπτει

$$0 = \rho_{n+1} \left((\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)}) - \gamma_{n+1} (\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{A}\mathbf{r}^{(n)}) \right) \quad (53)$$

και επειδή $\rho_{n+1} \neq 0$ προκύπτει

$$\gamma_{n+1} = \frac{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)})}{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{A}\mathbf{r}^{(n)})} \quad (54)$$

Εξάλλου, αν πάρουμε το εσωτερικό γινόμενο των δύο μελών της (52) με το $\mathbf{r}^{(n-1)}$ προκύπτει

$$0 = \rho_{n+1} \left(-\gamma_{n+1} (\mathbf{r}^{(n-1)}, \mathbf{A}\mathbf{r}^{(n)}) \right) + (1 - \rho_{n+1}) \left(\mathbf{r}^{(n-1)}, \mathbf{r}^{(n-1)} \right) \quad (55)$$

ή

$$\rho_{n+1} = \left[\mathbf{1} + \frac{(\mathbf{r}^{(n-1)}, \mathbf{A}\mathbf{r}^{(n)})}{(\mathbf{r}^{(n-1)}, \mathbf{r}^{(n-1)})} \cdot \gamma_{n+1} \right]^{-1} . \quad (56)$$

Επιπλέον, αντικαθιστώντας όπου n το $n - 1$ στην (52) έχουμε

$$\mathbf{r}^{(n)} = \rho_n(\mathbf{r}^{(n-1)} - \gamma_n \mathbf{A} \mathbf{r}^{(n-1)}) + (1 - \rho_n) \mathbf{r}^{(n-2)} \quad (57)$$

και αν πάρουμε το εσωτερικό γινόμενο των δύο μελών με το $\mathbf{r}^{(n)}$ προκύπτει

$$(\mathbf{r}^{(n-1)}, \mathbf{A} \mathbf{r}^{(n)}) = -\frac{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)})}{\gamma_n \rho_n} \quad (58)$$

έτσι λοιπόν η (56) γίνεται

$$\rho_{n+1} = \left[\mathbf{1} - \frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \cdot \frac{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)})}{(\mathbf{r}^{(n-1)}, \mathbf{r}^{(n-1)})} \cdot \frac{\mathbf{1}}{\rho_n} \right]^{-1} . \quad (59)$$

Συνοψίζοντας τα ανωτέρω η μέθοδος CG μπορεί επίσης να οριστεί ως εξής

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = \rho_{n+1}(\mathbf{u}^{(n)} + \gamma_{n+1}\mathbf{r}^{(n)}) + (1 - \rho_{n+1})\mathbf{u}^{(n-1)} \quad (60)$$

όπου

$$\rho_1 = 1$$

$$\rho_{n+1} = \left[1 - \frac{\gamma_{n+1}}{\gamma_n} \cdot \frac{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)})}{(\mathbf{r}^{(n-1)}, \mathbf{r}^{(n-1)})} \cdot \frac{1}{\rho_n} \right]^{-1}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (61)$$

και

$$\gamma_{n+1} = \frac{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{r}^{(n)})}{(\mathbf{r}^{(n)}, \mathbf{A}\mathbf{r}^{(n)})} \quad (62)$$

Παρατηρήσεις

- Από την (60) παρατηρούμε ότι η μέθοδος CG έχει την ίδια μορφή με την μέθοδο SI με τη μόνη διαφορά ότι εδώ οι παράμετροι είναι μεταβλητές (ενώ στην SI είναι $\gamma_1 = \gamma_2 = \dots = \bar{\rho}$), που εκλέγονται έτσι ώστε να ελαχιστοποιούν την τετραγωνική συνάρτηση $\mathbf{Q}(\mathbf{u})$.
- Πράγματι, αναμένεται η μέθοδος CG να παρουσιάζει μια καλύτερη ταχύτητα σύγκλισης συγκριτικά με την εφαρμογή των ημιεπαναληπτικών τεχνικών (SI), εφόσον εμπεριέχει μια επιπλέον παράμετρο γ_{n+1} η οποία είναι μεταβλητή (ενώ είναι σταθερά στην SI).
- Η μέθοδος CG απαιτεί περισσότερους υπολογισμούς ανά επανάληψη αλλά όμως δεν απαιτεί την εκτίμηση της μεγαλύτερης και μικρότερης ιδιοτιμής του πίνακα \mathbf{A} .
- Επίσης, αποδεικνύεται (Young (1975)) ότι για κάθε n ισχύει

$$\|\hat{\mathbf{d}}^{(n)} - \bar{\mathbf{u}}\|_{\mathbf{A}^{\frac{1}{2}}} \leq \|\mathbf{u}^{(n)} - \bar{\mathbf{u}}\|_{\mathbf{A}^{\frac{1}{2}}} \quad (63)$$

όπου $\bar{\mathbf{u}}$ είναι η ακριβής λύση του συστήματος (27), $\hat{\mathbf{d}}^{(n)}$ είναι η προσεγγιστική λύση που προκύπτει με την μέθοδο CG και $\mathbf{u}^{(n)}$ είναι η προσεγγιστική λύση που προκύπτει με την μέθοδο SI.

- Η σχέση (63) δείχνει ένα ουσιαστικό πλεονέκτημα της μεθόδου CG έναντι της μεθόδου SI διότι χρησιμοποιεί μόνο το άνω και κάτω φράγμα για τις ιδιοτιμές του πίνακα \mathbf{A} , ενώ η μέθοδος SI έχει το πλεονέκτημα της διανομής των ιδιοτιμών του G .
- Τελικά, παρατηρούμε ότι από την (63) είναι φανερό ότι η μέθοδος CG είναι καλύτερη από μια γραμμική μη-στατική μέθοδο δεύτερου βαθμού, λόγω της ελαχιστοποίησης της $\mathbf{A}^{\frac{1}{2}}$ -norm του διανύσματος σφάλματος.

Εφόσον μπορούμε να έχουμε εκτιμήσεις για την ταχύτητα σύγκλισης των μεθόδων SI βρίσκουμε ένα κάτω φράγμα της ταχύτητας σύγκλισης της μεθόδου CG. Συνεπώς, από την (63) και από το ότι για την μέθοδο SI ισχύει

$$\|\hat{u}^{(n)} - \bar{u}\|_{A^{\frac{1}{2}}} \leq \frac{2r^{n/2}}{1+r^n} \|u^{(0)} - \bar{u}\|_{A^{\frac{1}{2}}} \quad (64)$$

προκύπτει άμεσα ότι

$$\|\hat{u}^{(n)} - \bar{u}\|_{A^{\frac{1}{2}}} \leq \frac{2r^{n/2}}{1+r^n} \|\hat{u}^{(0)} - \bar{u}\|_{A^{\frac{1}{2}}} \quad (65)$$

υποθέτοντας ότι $\hat{u}^{(0)} = u^{(0)}$, όπου

$$r \equiv \tau = \frac{1 - \sqrt{1 - \sigma^2}}{1 + \sqrt{1 + \sigma^2}}$$

και

$$\sigma = \frac{\beta - \alpha}{2 - \beta - \alpha}$$

Αλγόριθμος της βασικής μεθόδου

των Συζυγών Κατευθύνσεων (Conjugate-Gradient(CG))

B1. Διάβασε \mathbf{u}_0 , ϵ , $\mathbf{max_iter}$

B2. $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{u}_0$

B3. $\mathbf{i} = 0$

B4. Για $\mathbf{i} = 0, 1, 2, \dots, \mathbf{max_iter}$

$$\mathbf{w} = \mathbf{A}\mathbf{p}_i$$

$$\alpha_i = \|\mathbf{r}_i\|_2^2 / \mathbf{p}_i^T \mathbf{w}$$

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{u}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{w}$$

$$\text{αν ισχύει } \|\mathbf{r}_{i+1}\|_2^2 < \epsilon$$

τότε τύπωσε τη λύση \mathbf{u}_{i+1}

διαφορετικά

$$\beta_i = \|\mathbf{r}_{i+1}\|_2^2 / \|\mathbf{r}_i\|_2^2$$

$$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{r}_{i+1} + \beta_i \mathbf{p}_i$$

B5. Τύπωσε (“Οχι σύγκλιση μετά από $\mathbf{max_iter}$ επαναλήψεις”)

B6. Τέλος

Παράδειγμα της βασικής μεθόδου CG

Δίνεται το γραμμικό σύστημα $\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{b}$ όπου

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 1 \\ 1 & 1 & 5 \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 7 \\ 7 \\ 7 \end{bmatrix}.$$

Εφαρμόστε δύο βήματα της βασικής μεθόδου CG (με αρχικό διάνυσμα $[\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}]^T$) για την επίλυση του ανωτέρω γραμμικού συστήματος.

$$\mathbf{u}_0 = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}), \quad \mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{u}_0 = (7, 7, 7)^T$$

$i = 0$

$$\mathbf{w} = \mathbf{A}\mathbf{p}_0 = (49, 49, 49)^T$$

$$\alpha_0 = \frac{\|\mathbf{r}_0\|_2^2}{\mathbf{p}_0^T \mathbf{w}} = 0.1429$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_0 + \alpha_0 \mathbf{p}_0 = (1.0003, 1.0003, 1.0003)^T$$

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0 - \alpha_0 \mathbf{w} = (-0.0021, -0.0021, -0.0021)^T$$

$$\beta_0 = \frac{\|\mathbf{r}_1\|_2^2}{\|\mathbf{r}_0\|_2^2} = 9 \times 10^{-8}$$

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{r}_1 + \beta_0 \mathbf{p}_0 = (-0.0021, -0.0021, -0.0021)^T$$

$i = 1$

$$\mathbf{w} = \mathbf{A}\mathbf{p}_1 = (-0.0147, -0.0147, -0.0147)^T$$

$$\alpha_1 = \frac{\|\mathbf{r}_1\|_2^2}{\mathbf{p}_1^T \mathbf{w}} = 0.1429$$

$$\mathbf{u}_2 = \mathbf{u}_1 + \alpha_1 \mathbf{p}_1 = (1.0000, 1.0000, 1.0000)^T$$

Αλγόριθμος της προρυθμισμένης μεθόδου των Συζυγών Κατευθύνσεων (Preconditioned Conjugate-Gradient(PCG))

B1. Εύρεση ενός Preconditioner **M**

B2. Διάβασε \mathbf{u}_0 , ϵ , **max_iter**

B3. $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{u}_0$

B4. $\mathbf{p}_0 = \mathbf{y}_0 = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}_0$ (επίλυση του γρ. συστ. $\mathbf{M}\mathbf{y}_0 = \mathbf{r}_0$)

B5. Για $i = 0, 1, 2, \dots, \mathbf{max_iter}$

$$\mathbf{w} = \mathbf{A}\mathbf{p}_i$$

$$\alpha_i = \mathbf{y}_i^T \mathbf{r}_i / \mathbf{p}_i^T \mathbf{w}$$

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{u}_i + \alpha_i \mathbf{p}_i$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_i \mathbf{w}$$

$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}_{i+1}$ (επίλυση του γρ. συστ. $\mathbf{M}\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{r}_{i+1}$)

αν ισχύει $\|\mathbf{r}_{i+1}\|_2^2 < \epsilon$

τότε τύπωσε τη λύση \mathbf{u}_{i+1}

διαφορετικά

$$\beta_i = \mathbf{y}_{i+1}^T \mathbf{r}_{i+1} / \mathbf{y}_i^T \mathbf{r}_i$$

$$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{y}_{i+1} + \beta_i \mathbf{p}_i$$

B6. Τύπωσε ("Όχι σύγκλιση μετά από **max_iter** επαναλήψεις")

B7. Τέλος