دانشکده علوم ریاضی

پایان‌نامه

جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد ریاضی کاربردی

عنوان

بهبود همگرایی روش GMRES با شروع مجدد

استاد راهنما

خانم دکتر فائزه توتونیان مشهد

استاد مشاور

آقای دکتر هاشمی مهنه

نگارش

زهرا عسگری

اسفند ۱۳۹۰

پیش‌گفتار

شاید این اغراق نباشد که همهٔ مسائل دستگاه‌های خطی تقریباً در همهٔ کاربردهای عملی از جمله در مهندسی برق، مکانیک، شیمی، راه و ساختمان و همچنین مسائل پیدا کردن دترمینان، معکوس و کهادهای اصلی مقدم ماتریس و غیره پیش می‌آیند. یک دسته از روش‌ها برای حل دستگاه

$$Ax = b \qquad (۱)$$

روش‌های تکراری هستند که معمولاً برای حل یک دستگاه خطی تنک و خیلی بزرگ (۱) و حاصل از کاربردهای مهندسی استفاده می‌شوند. روش‌های تکراری هرگز ماتریس A را تغییر نمی‌دهند و فقط به ذخیره‌سازی تعدادی بردار با طول n در یک زمان نیاز دارند. در چند سال اخیر، روشی که GMRES نامیده می‌شود به‌طور وسیعی توجه متخصصین جبرخطی عددی را در زمینه حل دستگاه‌های تنک و بزرگ به خود جلب کرده است.این روش که در سال **۱۹۸۶** توسط سد[۱] و شولتز [۲] ارائه شد مبتنی بر طرح کلاسیکی است که در سال **۱۹۵۱** توسط آرنولدی[۳] معرفی شده است و اثر آرنولدی نامیده می‌شود. این روش یک پایه یکامتعامد از یک زیر فضا که زیر فضای کریلف[۴] نامیده می‌شود، می‌سازد. روش آرنولدی می‌تواند فقط با استفاده از ضرب ماتریس بردار پیاده‌سازی شود و بنابراین برای ماتریس‌های تنک مناسب است، زیرا عناصر غیر صفر حفظ می‌شوند. روش GMRES جهت می‌نیمم سازی نرم بردار مانده $b - Ax$ بر روی همه بردارهای زیر فضای کریلف m بعدی طرح ریزی شده است. الگوریتم GMRES با بزرگ شدن m غیر عملی می‌شود زیرا حافظه و محاسبات مورد نیاز با بزرگ شدن m افزایش می‌یابد. برای حل این مشکل از شروع مجدد استفاده می‌کنند. یک مشکل عمدهٔ GMRES با شروع مجدد همگرایی تضمین نشده آن است. هدف این پایان‌نامه مطالعه و بررسی روش‌هایی برای بهبود دقت و همگرایی روش GMRES است.

در فصل اول روش GMRES معرفی شده است، قبل از آن ابزار و مفاهیم مورد نیاز بیان شده‌اند. در فصل دوم روش‌های GMRES تکمیل شده با بردارهای ویژه ($\mathrm{GMRES-E}$) و GMRES با شروع مجدد کاهش یافته ($\mathrm{GMRES-DR}$) را معرفی می‌کنیم که برخی اطلاعات را در زمان شروع مجدد حفظ می‌کنند و باعث بهبود سرعت همگرایی و دقت روش می‌شوند. در انتهای فصل پیاده سازی موازی این روش‌ها ارائه می‌شوند. در فصل سوم به معرفی روش تکراری GMRES بلوکی می‌پردازیم که چون این روش نیز نیاز به شروع مجدد دارد و شروع مجدد همگرایی روش را تحت تأثیر قرار می‌دهد، روش $\mathrm{GMRES-DR}$ بلوکی را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. در پایان هر فصل، نتایج عددی و مقایسه این روش‌ها ارائه شده است.

[۱] Saad
[۲] Schultz
[۳] Arnoldi
[۴] Krylov

فهرست مطالب

پیش‌گفتار آ

۱ مقدمه ۱

۱.۱ بردارهای متعامد و زیرفضاها ۱

۲.۱ فرمول شرمن - موریسون ۳

۳.۱ حل دستگاه معادلات خطی ۴

۱.۳.۱ مقدمه ۴

۴.۱ روش‌های تصویری ۵

۱.۴.۱ زیرفضای کریلف ۶

۲.۴.۱ الگوریتم آرنولدی ۸

۳.۴.۱ پیاده سازی عملی ۱۰

۵.۱ روش مانده مینیمال تعمیم یافته ۱۱

۱.۵.۱ الگوریتم GMRES منظم ۱۱

۲.۵.۱ همگرایی GMRES ۱۳

۳.۵.۱ GMRES با شروع مجدد ۱۴

۶.۱ مسأله کمترین توان‌های دوم ۱۴

۱.۶.۱ معکوس تعمیم یافته یا معکوس مور-پن رز یک ماتریس ۱۵

۷.۱ روش‌های تصویری برای پیدا کردن جفت ویژه ماتریس‌های بزرگ ۱۶

۱.۷.۱ روش‌های تصویری متعامد ۱۶

۲.۷.۱ روش‌های تصویری اریب ۱۸

۳.۷.۱ بهبود روند ریلی - ریتز برای مقادیر ویژه درونی ۲۰
۸.۱ روش‌های زیر فضای کریلف برای پیدا کردن جفت ویژه یک ماتریس ۲۲
۱.۸.۱ روش آرنولدی برای محاسبه مقادیر ویژه ماتریس با استفاده از روند ریلی - ریتز درونی . ۲۲

۲ بهبود سرعت همگرایی و دقت GMRES با شروع مجدد ۲۵
۱.۲ مقدمه ۲۵
۲.۲ استفاده از بردارهای ویژه برای بهبود همگرایی GMRES ۲۵
۱.۲.۲ $GMRES-E$ ۲۹
۲.۲.۲ تمام زیر فضا یک زیر فضای کریلف است ۳۵
۳.۲ روش GMRES با شروع مجدد کاهش یافته ۳۸
۱.۳.۲ پیاده سازی $GMRES-DR$ ۳۹
۴.۲ تمام زیر فضا یک زیر فضای کریلف است ۴۱
۵.۲ بهبود دقت GMRES با شروع مجدد کاهش یافته ۴۴
۱.۵.۲ تجزیه و تحلیل یک شروع مجدد از GMRES با کاهش شروع مجدد ۴۸
۶.۲ نتایج عددی ۵۴
۱.۶.۲ نتایج به‌دست آمده برای روش $GMRES-E$ ۵۴
۲.۶.۲ نتایج به‌دست آمده برای روش $GMRES-DR$ ۵۷
۳.۶.۲ اهمیت زیر فضای کریلف ۵۹
۷.۲ پیاده‌سازی موازی ۶۱
۱.۷.۲ ضرب نقطه‌ای دو بردار ۶۳
۲.۷.۲ ضرب ماتریس بردار ۶۵
۳.۷.۲ ضرب ماتریس ماتریس ۶۷
۸.۲ پیاده سازی موازی روش‌های $GMRES-E$ و $GMRES-DR$ ۶۹

۳ روش GMRES بلوکی ۷۲
۱.۳ روش GMRES بلوکی ۷۵
۲.۳ مقایسه روش بلوکی با روش غیر بلوکی ۷۶

۳.۳ GMRES بلوکی با شروع مجدد کاهش یافته ۸۱
۱.۳.۳ الگوریتم GMRES − DR بلوکی ۸۵
۴.۳ نتایج عددی ۸۷
۵.۳ نتیجه‌گیری و پیشنهادات برای کارهای آینده ۸۸

آ کدهای برنامه‌نویسی به زبان MATLAB **۸۹**

ب کدهای برنامه‌نویسی به زبان FORTRAN90 **۹۰**

پ کدهای برنامه‌نویسی به زبان MPI − FORTRAN **۹۱**

واژه‌نامه فارسی به انگلیسی **۹۵**

واژه‌نامه انگلیسی به فارسی **۹۷**

لیست جداول

۱.۲ مقادیر ویژه ۱، ۲، ... ، ۱۰۰۰ . . . . . ۵۶

۲.۲ مقادیر ویژه ۰/۰۱، ۰/۰۲، ۰/۰۳، ۰/۰۴، ۱۰، ۱۱، ... ، ۱۰۰۵ . . . . . ۵۷

۳.۲ زمان‌های MPI برای $GMRES - E$ ۷۰

۴.۲ زمان‌های MPI برای $GMRES - DR$ ۷۱

۱.۳ مقایسه GMRES با $block - GMRES$ با ۳ طرف راست ۷۸

۲.۳ مقایسه GMRES منظم با کاهشی و $Block - GMRES$ با ۳ طرف راست ۸۸

فصل ۱

مقدمه

مسأله حل دستگاه خطی $Ax = b$ در دامنه وسیعی از کاربردها مطرح می‌شود. به‌عنوان یک حقیقت باید گفته شود که تقریباً جواب‌های عددی همه مسائل مهندسی عملی و علوم کاربردی نیاز به حل یک مسأله خطی دارند. یک دسته از روش‌های معمول برای حل دستگاه خطی روش‌های تکراری هستند که معمولاً برای حل یک دستگاه خطی تنک و خیلی بزرگ استفاده می‌شوند. ما در این فصل، روش GMRES را معرفی خواهیم کرد. قبل از آن ابزار و مفاهیم مورد نیاز را بیان می‌کنیم.

۱.۱ بردارهای متعامد و زیرفضاها

یک مجموعه از بردارهای $G = \{a_۱, ..., a_r\}$ متعامد نامیده می‌شود اگر برای هر i و j که $i \neq j$ داشته باشیم:

$$(a_i, a_j) = ۰$$

و یکامتعامد نامیده می‌شوند اگر علاوه بر شرط بالا، نرم-دو هر بردار G، برابر با یک باشد. برداری که بر همهٔ بردارهای یک زیرفضا مانند S عمود باشد، بردار عمود بر زیرفضا نامیده می‌شود. مجموعهٔ همهٔ بردارهایی که بر زیرفضای S عمود هستند، زیر فضای متعامد بر S نامیده می‌شود و با $S^\perp$ نشان داده می‌شود. فضای $\mathbb{R}^n$ برابر با جمع مستقیم S و $S^\perp$ است. بنابراین هر بردار x را می‌توان به شکل یکتایی به‌صورت جمع یک بردار در S و یک بردار در $S^\perp$ نوشت.

هر زیرفضا یک پایه یکامتعامد می‌پذیرد که با اختیار کردن هر پایه از آن و یکامتعامد کردن آن به‌دست می‌آید. یکامتعامد بودن از الگوریتمی که فرایند گرام-اشمیت [۱] نامیده می‌شود، به‌دست می‌آید. این الگوریتم به‌صورت زیر

[۱] Gram-Schmidt

می‌باشد. فرض کنید یک مجموعه از بردارهای مستقل خطی $G = \{x_۱, ..., x_r\}$ مفروض باشد. ابتدا بردار $x_۱$ را یکه می‌کنیم یعنی بر نرم-دو خودش تقسیم می‌کنیم و بردار حاصل را $q_۱$ می‌نامیم. سپس بردار $x_۲$ نسبت به $q_۱$ متعامد می‌شود. این‌کار با کم کردن مضربی از $q_۱$ از $x_۲$ برای متعامد ساختن بردار حاصل بر $q_۱$ انجام می‌شود، یعنی

$$x_۲ \longleftarrow x_۲ - (x_۲, q_۱)\, q_۱$$

برای به‌دست آمدن $q_۲$ ، بردار حاصل دوباره یکه می‌شود. i امین گام از فرایند گرام-اشمیت از متعامد سازی بردار x_i بر همهٔ بردارهای قبلی q_j تشکیل می‌شود.

Algorithm 1·1 Gram-Schmidt

1. Compute $r_{۱۱} = \| x_۱ \|_۲$. if $r_{۱۱} = 0$ stop, else compute $q_۱ = x_۱/r_{۱۱}$
2. For $j = 2, ..., r$, Do
3. Compute $r_{ij} = (x_j, q_i)$ for $i = 1, 2, ..., j-1$
4. $\hat{q} = x_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} q_i$
5. $r_{jj} = \| \hat{q} \|_۲$
6. If $r_{jj} = 0$ then stop, else $q_j = \hat{q}/r_{jj}$
7. EndDo

به آسانی ثابت می‌شود که الگوریتم بالا با شکست مواجه نمی‌شود، یعنی r گام کامل خواهد شد اگر و فقط اگر بردارهای $x_۱$، $x_۲$، ... ، x_r مستقل خطی باشند. از گام ۴ و ۵ واضح است که در هر مرحله از الگوریتم، رابطهٔ زیر برقرار است:

$$x_j = \sum_{i=۱}^{j-۱} r_{ij} q_i$$

اگر $X = [x_۱, ..., x_r]$ و $Q = [q_۱, ..., q_r]$ و R ماتریس بالا مثلثی $r \times r$ که عناصر غیر صفر آن، r_{ij} از الگوریتم بالا به‌دست می‌آیند، آن‌گاه رابطهٔ بالا را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$X = QR$$

این تجزیه، تجزیه QR ماتریس X نامیده می‌شود. با توجه به مطالب بالا، تجزیه QR ماتریس X زمانی وجود دارد که ستون‌های ماتریس X مستقل خطی باشند. الگوریتم بالا فرایند گرام-اشمیت استاندارد است. فرمول‌بندی‌های

دیگری برای الگوریتم وجود دارد که خاصیت‌های عددی بهتری دارند. معروف‌ترین آن‌ها فرایند گرام-اشمیت اصلاح شده [۲] (MGS) است که به‌صورت زیر می‌باشد:

Algorithm 1·2 MGS

1. Define $r_{11} = \| x_1 \|_2$. If $r_{11} = 0$ stop, else $q_1 = x_1/r_{11}$
2. For $j = 2, ..., r$, Do
3. Define $\hat{q} = x_j$
4. For $i = 1, ..., j-1$, Do
5. $r_{ij} = (\hat{q}, q_i)$
6. $\hat{q} = \hat{q} - r_{ij} q_i$
7. EndDo
8. Compute $r_{jj} = \| \hat{q} \|_2$
9. If $r_{jj} = 0$ then stop, else $q_j = \hat{q}/r_{jj}$
10. EndDo

۲.۱ فرمول شرمن - موریسون

در بسیاری از کاربردها، با مفروض بودن معکوس یک ماتریس A، ما باید معکوس یک ماتریس دیگر مانند B را پیدا کنیم که با A فقط در یک اختلال رتبه-یک تفاوت دارد. طبیعتاً این سؤال مطرح می‌شود که آیا معکوس B را می‌توان بدون شروع مجدد همهٔ محاسبات به‌دست آورد، یعنی آیا معکوس B را می‌توان با استفاده از معکوس A که قبلاً محاسبه شده است، به‌دست آورد. فرمول شرمن-موریسون که در زیر بیان شده است، نشان می‌دهد که چگونه این کار می‌تواند انجام شود.

اگر u و v دو بردار و A یک ماتریس نامنفرد باشد و $v^T A^{-1} u \neq -1$، آنگاه خواهیم داشت

$$\left(A - uv^T\right)^{-1} = A^{-1} + \alpha \left(A^{-1} u v^T A^{-1}\right)$$

[۲] Modified Gram-Schmidt

که در آن

$$\alpha = \frac{۱}{(۱ - v^T A^{-۱} u)}$$

زمانی‌که $v^T A^{-۱} u \neq ۱$.

۳.۱ حل دستگاه معادلات خطی

۱.۳.۱ مقدمه

مسأله حل دستگاه خطی

$$Ax = b$$

در دامنهٔ وسیعی از کاربردها مطرح می‌شود. به‌عنوان یک حقیقت باید گفته شود که جواب‌های عددی تقریباً همهٔ مسائل عملی و علوم کاربردی نیاز به جواب یک مسأله خطی دارند. معمولاً دو نوع روش در محاسبات عددی استفاده می‌شوند.

- روش‌های مستقیم
- روش‌های تکراری

روش‌های مستقیم از یک تعداد متناهی گام تشکیل می‌شوند که همگی باید برای هر روش مفروض قبل از به‌دست آمدن جواب، انجام شوند. از طرف دیگر روش‌های تکراری مبتنی بر محاسبه یک دنباله از تقریب‌ها برای جواب x هستند و یک کاربر می‌تواند هرگاه یک جواب با دقت معین به‌دست آمد، یا یک تعداد معین تکرار کامل شد، متوقف گردد.

اگر ماتریس A نسبتاً بزرگ باشد روش‌های مستقیم مبتنی بر مثلثی‌سازی ماتریس A از جهت زمان کامپیوتری و ذخیره‌سازی توصیه نمی‌شوند. از طرف دیگر وضعیت‌های عملی دیگر نظیر گسسته‌سازی معادلات مشتقات جزئی وجود دارند که در آن‌ها ماتریس ضرایب می‌تواند به بزرگی چند صد هزار باشد برای چنین مسأله‌هایی روش‌های مستقیم غیرعملی می‌شوند. برای مثال اگر A از مرتبهٔ ۱۰۰۰۰۰ × ۱۰۰۰۰۰ باشد آنگاه ممکن است ۲ یا ۳ روز برای یک کامپیوتر IBM۳۷۰ طول بکشد تا دستگاه $Ax = b$ با استفاده از روش حذفی گاوس یا روش‌های متعامدسازی

هاوس هولدر و گیونز حل شود. به‌علاوه بیشتر مسائل تنک هستند و تنک بودن در طی فرایند مثلثی‌سازی از بین می‌رود و به‌طور قابل ملاحظه‌ای توسعه می‌یابد. بنابراین در انتها با یک ماتریس خیلی بزرگ با عناصر مخالف صفر بسیار زیادی سر و کار خواهیم داشت و ذخیره‌سازی یک عمل بسیار سخت می‌شود. برای چنین مسائلی، توصیه می‌شود از رده‌ای از روش‌هایی که روش‌های تکراری نامیده می‌شوند، استفاده گردد که هرگز ماتریس A را تغییر نمی‌دهند و فقط به ذخیره‌سازی تعدادی بردار با طول n در یک زمان نیاز دارند. در این پایان‌نامه به بررسی روش تکراری تصویری GMRES می‌پردازیم. برای این منظور ابتدا به‌طور مختصر روش‌های تصویری را توضیح می‌دهیم.

۴.۱ روش‌های تصویری

دستگاه خطی $Ax = b$ را در نظر بگیرید که در آن A یک ماتریس $n \times n$ است. ایده اصلی روش‌های تصویری، استخراج یک جواب تقریبی برای این دستگاه، از زیر فضایی از $\mathbb{R}^n$ است. فرض کنیم κ_m زیر فضایی باشد که جواب تقریبی از آن استخراج می‌گردد و بعد آن m باشد در این‌صورت، در حالت‌کلی m شرط باید بر مسأله تحمیل شود تا جواب تقریبی به‌دست آید. یک روش کلی برای به‌دست آوردن این محدودیت‌ها اعمال m شرط تعامد است. به‌ویژه بردار ماندهٔ $b - Ax$ مقید می‌شود که بر m بردار مستقل خطی عمود شود. این بردارها زیرفضای دیگری از بعد m را که $\mathcal{L}_m$ نامیده خواهد شد، تعریف می‌کنند. این چارچوب ساده که برای بسیاری از روش‌های ریاضی متفاوت به‌کار می‌رود شرط پترو -گالرکین[۳] نامیده می‌شود. دو ردهٔ کلی از روش‌های تصویری عبارت‌اند از: متعامد و اریب. در یک روش تصویری متعامد، زیرفضای $\mathcal{L}_m$ همان زیر فضای κ_m اختیار می‌شود و در یک روش تصویری اریب $\mathcal{L}_m$ متفاوت با κ_m اختیار می‌شود. این تفاوت نسبتاً مهم است و منجر به الگوریتم‌های متفاوتی می‌شود. پس یک روش تصویری جواب تقریبی $\tilde{x}$ را به‌گونه‌ای انتخاب می‌کند که

$$\tilde{x} \in \kappa_m \qquad \text{و} \qquad b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}_m$$

اگر x_0 یک حدس اولیهٔ دلخواه باشد جواب تقریبی را باید از زیرفضای آفین $x_0 + \kappa_m$ به‌جای فضای برداری همگن κ_m جستجو کرد. از این‌رو $\tilde{x}$ را باید به‌گونه‌ای به‌دست آورد که

$$\tilde{x} \in x_0 + \kappa_m \qquad \text{و} \qquad b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L}_m$$

[۳] Petrov -Galerkin

دو نتیجه مهم زیر را می‌توان در مورد بهینگی روش‌های تصویری بیان کرد.

گزاره ۱.۴.۱. *فرض کنید A یک ماتریس معین مثبت باشد و $\mathcal{L}_m = \kappa_m$ در این‌صورت یک بردار $\tilde{x}$ از یک روش تصویری (متعامد) روی κ_m با بردار شروع x_0 نتیجه خواهد شد اگر و فقط اگر A-نرم خطا روی $x_0 + \kappa_m$ می‌نیمم باشد یعنی اگر و فقط اگر*

$$E(\tilde{x}) = \min_{x \in x_0 + \kappa_m} E(x)$$

که در آن x_* جواب واقعی است و

$$E(x) \equiv (A(x_* - x), x_* - x)^{1/2}$$

برهان. به مرجع [۳۰] رجوع شود. □

گزاره ۲.۴.۱. *فرض کنید A یک ماتریس مربعی دلخواه باشد و $\mathcal{L}_m = A\kappa_m$. در این‌صورت یک بردار $\tilde{x}$ از یک روش تصویری (اریب) روی κ_m و عمود بر $\mathcal{L}_m$ با بردار شروع x_0 نتیجه خواهد شد اگر و فقط اگر نرم- دو بردار ماندهٔ $b - Ax$ روی $x \in x_0 + \kappa_m$ می‌نیمم باشد یعنی اگر و فقط اگر*

$$R(\tilde{x}) = \min_{x \in x_0 + \kappa_m} R(x)$$

که در آن

$$R(x) \equiv \| b - Ax \|_2$$

برهان. به مرجع [۳۰] رجوع شود. □

۱.۴.۱ زیرفضای کریلف

یک زیرفضای کریلف از بعد m و تعریف شده توسط یک ماتریس $n \times n$ مانند A و یک بردار v به‌صورت زیر ارائه می‌شود:

$$\kappa_m(A, v) = \text{span}\{v, Av, A^2v, ..., A^{m-1}v\}$$

برای سادگی هنگامی که ابهامی وجود نداشته باشد، این زیرفضا را با κ_m نشان می‌دهیم. اگر $v = r_0 = b - Ax_0$ اختیار شود، از نقطه نظر تئوری تقریب، واضح است که تقریب‌های حاصل از یک روش زیر فضای کریلف به شکل زیر هستند

$$A^{-1}b \approx x_0 + q_{m-1}(A)\, r_0$$

که در آن q_{m-1} یک چند جمله‌ای خاص از درجه $m-1$ است. بعد زیرفضای کریلف در هر مرحله از روند تقریب افزایش می‌یابد. همان‌طور که ملاحظه می‌کنیم κ_m زیرفضای همهٔ بردارهایی در $\mathbb{R}^n$ است که آن‌ها را می‌توان به شکل $x = p(A)\, v$ نوشت که در آن p یک چند جمله‌ای از درجهٔ کوچکتر یا مساوی $m-1$ است. یادآوری می‌کنیم که چند جمله‌ای مینیمال بردار v چند جمله‌ای تکین مخالف صفر p از کمترین درجه است به‌طوری‌که $p(A)\, v = 0$. درجه چند جمله‌ای مینیمال v نسبت به A، رتبهٔ v نسبت به A نامیده می‌شود و برای سادگی اگر ابهامی وجود نداشته باشد رتبهٔ v نامیده می‌شود. یک نتیجه از قضیه کیلی -هامیلتون این است که رتبهٔ v متجاوز از n نخواهد بود. در مورد بعد زیر فضای کریلف κ_m گزاره‌های زیر در مرجع [۳۰] ارائه شده‌اند.

گزاره ۳.۴.۱. *فرض کنید μ رتبهٔ v باشد. در این‌صورت κ_μ تحت A پایا است و $\kappa_m = \kappa_\mu$ برای همه $m \geq \mu$.*

برهان. به مرجع [۳۰] رجوع شود. □

گزاره ۴.۴.۱. *زیرفضای کریلف κ_m دارای بعد m است اگر و فقط اگر رتبه μ بردار v نسبت به A کمتر از m نباشد.*

یعنی

$$\dim(\kappa_m) = m \qquad \longleftrightarrow \qquad \operatorname{grade}(v) \geq m$$

بنابراین

$$\dim(\kappa_m) = \min\{m, \operatorname{grade}(v)\}$$

برهان. به مرجع [۳۰] رجوع شود. □

در حل دستگاه معادلات خطی دو انتخاب کلی برای $\mathcal{L}_m$ منجر به بهترین روش‌های شناخته شده می‌شوند. اولین انتخاب $\mathcal{L}_m = \kappa_m$ و $\mathcal{L}_m = A\kappa_m$ می‌باشد و روش‌های ارائه شده در این پایان‌نامه در این دسته قرار می‌گیرند. در

انتخاب دوم $\mathcal{L}_m$ به‌صورت زیرفضای کریلف تولید شده وابسته به A^T یعنی $\mathcal{L}_m = \kappa_m\left(A^T, r_0\right)$ در نظر گرفته می‌شود.

۲.۴.۱ الگوریتم آرنولدی

زیر روال آرنولدی [۱] یک الگوریتم برای ساختن یک پایه یکا متعامد برای زیر فضای کریلف κ_m است. در حساب دقیق یک گونه از الگوریتم به‌صورت زیر است.

Algorithm 1·3 Arnoldi

1. Choose a vector v_1 such that $\| v_1 \|_2 = 1$
2. For $j = 1, 2, ..., m$ Do
3. Compute $h_{ij} = (Av_j, v_i)$ for $i = 1, 2, ..., j$
4. Compute $w_j = Av_j - \sum_{i=1}^{j} h_{ij} v_i$
5. $h_{j+1,j} = \| w_j \|_2$
6. If $h_{j+1,j} = 0$ then stop
7. $v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j}$
8. EndDo

الگوریتم در هر مرحله به کمک روش گرام - اشمیت استاندارد بردار آرنولدی v_j را در A ضرب می‌کند و بردار حاصل یعنی w_j را بر برداهای قبلی v_jها یکامتعامد می‌سازد. الگوریتم زمانی متوقف می‌شود که بردار w_j در گام ۴، برابر صفر شود. حال تعدادی از ویژگی‌های سادهٔ الگوریتم را بیان می‌کنیم.

گزاره ۵.۴.۱. *فرض کنید الگوریتم ۱.۳ قبل از m مرحله متوقف نشود. در این‌صورت بردارهای v_1، v_2، ... ، v_m تشکیل یک پایه یکامتعامد برای زیرفضای کریلف*

$$\kappa_m = \text{span}\left\{v_1, Av_1, A^2 v_1, ..., A^{m-1} v_1\right\} \tag{۱.۱}$$

می‌دهند.

برهان. بردارهای v_j، $j = ۱, ۲, ...m$، یکامتعامد ساخته می‌شوند، برای اثبات پایه بودن این بردارها برای زیرفضای کریلف κ_m از این حقیقت استفاده می‌کنیم که هر بردار v_j را می‌توان به‌صورت $q_{j-۱}(A)\, v_۱$ نوشت که $q_{j-۱}$ یک چند جمله‌ای از درجهٔ $j-۱$ است. این را می‌توان به استقرا بر روی j نشان داد. نتیجه به‌وضوح برای $j = ۱$ برقرار است زیرا $v_۱ = q_۰(A)\, v_۱$ با $q_۰(A) \equiv ۱$. فرض کنید نتیجه برای هر عدد صحیح کمتر یا مساوی j برقرار باشد و $v_{j+۱}$ را در نظر بگیرید. داریم

$$h_{i+۱,j} v_{j+۱} = A v_j - \sum_{i=۱}^{j} h_{i,j} v_i = A q_{j-۱}(A)\, v_۱ - \sum_{i=۱}^{j} h_{i,j} q_{i-۱}(A)\, v_۱ \qquad (۲.۱)$$

این رابطه نشان می‌دهد که $v_{j+۱}$ را می‌توان به‌صورت $q_j(A)\, v_۱$، که q_j از درجهٔ j است نشان داد و اثبات کامل می‌شود. □

گزاره ۶.۴.۱. *فرض کنید V_m یک ماتریس $n \times m$ باشد که ستون‌های آن‌را بردارهای $v_۱$، $v_۲$، ... ، v_m تشکیل دهند و $\bar{H}_m$ یک ماتریس $(m+۱) \times m$ بالا هسنبرگی باشد که عناصر غیرصفر $h_{i,j}$ به وسیلهٔ الگوریتم ۳ ۰ ۱ تعریف شوند و H_m ماتریس حاصل از حذف آخرین سطر $\bar{H}_m$ باشد. آن‌گاه روابط زیر برقرارند:*

$$AV_m = V_m H_m + w e_m^T \qquad (۳.۱)$$

$$= V_{m+۱} \bar{H}_m \qquad (۴.۱)$$

$$V_m^T A V_m = H_m \qquad (۵.۱)$$

برهان. رابطه (۴.۱) از تساوی زیر که از گام‌های ۴، ۵، ۷ الگوریتم ۳ ۰ ۱ به‌دست می‌آید، حاصل می‌شود

$$A v_j = \sum_{i=۱}^{j+۱} h_{i,j} v_i, \qquad j = ۱, ۲, ..., m \qquad (۶.۱)$$

رابطهٔ (۳.۱) یک فرمول‌بندی ماتریسی از (۶.۱) است. رابطه (۵.۱)از ضرب دو طرف رابطهٔ (۳.۱) در V_m^T و استفاده از خاصیّت یکامتعامد بودن $\{v_۱, v_۲, ..., v_m\}$، به‌دست می‌آید. □

همان‌طور که قبلاً ذکر شد الگوریتم ممکن است با شکست مواجه شود زمانی که نرم w_j در گام خاصی مانند j، صفر شود. در این حالت، بردار $v_{j+۱}$ نمی‌تواند محاسبه شود و الگوریتم متوقف می‌شود.

گزاره ۷.۴.۱. *الگوریتم آرنولدی در گام jام با شکست مواجه می‌شود اگر و فقط اگر چند جمله‌ای مینیمال v_1 از رتبهٔ j باشد، علاوه‌بر این در این حالت زیر فضای κ_j تحت A پایا است.*

برهان. به مرجع [۳۰] رجوع شود. □

یک نتیجهٔ از گزارهٔ بالا این است که روش تصویری روی زیر فضای κ_j زمانی جواب دقیق ارائه می‌دهد که در مرحلهٔ jام با شکست مواجه شود، یعنی در گام ۵ام از الگوریتم ۱.۵ داشته باشیم $h_{j+1,j} = 0$.

۳.۴.۱ پیاده سازی عملی

در توصیف قبلی فرایند آرنولدی، در اصل به‌خاطر سادگی، حساب دقیق در نظر گرفته شده است. در عمل باید از روش گرام اشمیت اصلاح شده (MGS) به‌جای روش گرام اشمیت استاندارد استفاده کرد. الگوریتم آرنولدی با استفاده از روش گرام اشمیت اصلاح شده در الگوریتم زیر ارائه شده است.

Algorithm 1·4 Arnoldi MGS

1. Choose a vector v_1 such that $\| v_1 \|_2 = 1$
2. For $j = 1, 2, ..., m$ Do
3. Compute $w_j = Av_j$
4. For $i = 1, ..., j$, Do
5. $h_{ij} = (w_j, v_i)$
6. $w_j = w_j - h_{ij} v_i$
7. EndDo
8. $h_{j+1,j} = \| w_j \|_2$. If $h_{j+1,j} = 0$ stop
9. $v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j}$
10. EndDo

در حساب دقیق الگوریتم ۱.۴ و ۱.۳ معادل هستند ولی در صورت وجود خطای گرد کردن الگوریتم ۱.۴ قابل اطمینان‌تر است.

۵.۱ روش مانده مینیمال تعمیم یافته

روش مانده مینیمال تعمیم یافته(GMRES)[۴] یک روش تصویری متداول برای مسائل نامتقارن است (برای مثال [۲۸] را ببینید) که در آن κ_m زیر فضای کریلف m بعدی با $v_۱ = \frac{r_۰}{\| r_۰ \|_۲}$ به‌عنوان بردار شروع و $\mathcal{L}_m = A\kappa_m$ است. این روش از الگوریتم آرنولدی، برای ساخت یک پایهٔ یکامتعامد برای زیرفضای کریلف استفاده می‌کند و در این روش نرم مانده روی همهٔ بردارهای $x_۰ + \kappa_m$ می‌نیمم می‌شود.

۱.۵.۱ الگوریتم GMRES منظم

یک راه برای استخراج این الگوریتم استفاده از رابطهٔ (۴.۱) است. هر بردار x در $x_۰ + \kappa_m$ را می‌توان به‌صورت زیر نوشت:

$$x = x_۰ + V_m y \tag{۷.۱}$$

که در آن y یک بردار m بعدی است. تعریف می‌کنیم:

$$J(y) = \| b - Ax \|_۲ = \| b - A(x_۰ + V_m y) \|_۲ \tag{۸.۱}$$

رابطهٔ (۴.۱) نتیجه می‌دهد:

$$b - Ax = b - A(x_۰ + V_m y) \tag{۹.۱}$$

$$= r_۰ - AV_m y \tag{۱۰.۱}$$

$$= \beta v_۱ - V_{m+۱} \bar{H}_m y \tag{۱۱.۱}$$

$$= V_{m+۱} \left(\beta e_۱ - \bar{H}_m y \right) \tag{۱۲.۱}$$

چون ستون‌های $V_{m+۱}$ یکامتعامد هستند، می‌توان نوشت

$$J(y) = \| b - A(x_۰ + V_m y) \|_۲ = \| \beta e_۱ - \bar{H}_m y \|_۲ \tag{۱۳.۱}$$

[۴] Generalized Minimal Residual Method

روش GMRES بردار تقریبی را به‌دست می‌دهد که (۱۳.۱) را می‌نیمم می‌کند. با توجه به رابطهٔ (۷.۱) و (۱۳.۱) این تقریب به‌شکل $x_m = x_0 + V_m y_m$ به‌دست می‌آید به‌طوری‌که y_m تابع $J(y) = \| \beta e_1 - \bar{H}_m y \|_2$ را می‌نیمم می‌کند یعنی

$$x_m = x_0 + V_m y_m \tag{۱۴.۱}$$

که در آن

$$y_m = \text{argmin}_y \| \beta e_1 - \bar{H}_m y \|_2 \tag{۱۵.۱}$$

اگر m کوچک باشد محاسبهٔ y_m گران نیست زیرا جواب یک مسأله کمترین توان‌های دوم $(m+1) \times m$ است، این مطالب الگوریتم زیر را ارائه می‌دهد:

Algorithm1·5 GMRES

1. Compute $r_0 = b - Ax_0$, $\beta = \| r_0 \|_2$, and $v_1 = r_0/\beta$
2. For $j = 1, 2, ..., m$, Do
3. Compute $w_j = Av_j$
4. For $i = 1, ..., j$, Do
5. $h_{ij} = (w_j, v_i)$
6. $w_j = w_j - h_{ij} v_i$
7. EndDo
8. $h_{j+1,j} = \| w_j \|_2$. If $h_{j+1,j} = 0$ set $m = j$ and go to 11
9. $v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j}$
10. EndDo
11. Define the $(m+1) \times m$ Hessenberg matrix $\bar{H}_m = \{h_{ij}\}_{1 \le i \le m+1, 1 \le j \le m}$
12. Compute y_m, the minimizer of $\| \beta e_1 - \bar{H}_m y \|_2$, and $x_m = x_0 + V_m y_m$

۲.۵.۱ همگرایی GMRES

برای حل مسائل متقارن روش گرادیان مزدوج [۱۰] و [۱۲] بهترین روش تکراری است. این روش جواب تقریبی را از زیر فضای کریلف $\text{span}\{b, Ab, A^{۲}b, ..., A^{m-۱}b\}$ انتخاب می‌کند (هنگامی‌که تقریب اولیه $x_{۰}$ برابر صفر اختیار می‌شود). یک فرمول بازگشتی کارا برای تولید یک دنباله از بردارهای متعامد که زیر فضای کریلف را تولید می‌کنند، وجود دارد. همچنین، خواص همگرایی زیر فضای کریلف کاملاً قابل فهم است. آن‌ها به توزیع مقادیر ویژه وابسته هستند. یک کران ساده برای نرم مانده [۱۱] [۱۲] و [۲۴] روش گرادیان مزدوج (اعمال شده بر یک ماتریس معین مثبت) در تکرار mام عبارت است از:

$$\frac{\| r \|}{\| b \|} \leq ۲ \left(\left(\frac{\sqrt{\kappa}+۱}{\sqrt{\kappa}-۱} \right)^{m} + \left(\frac{\sqrt{\kappa}-۱}{\sqrt{\kappa}+۱} \right)^{m} \right)^{-۱} \leq ۲ \left(۱ - \frac{۲}{\sqrt{\kappa}+۱} \right)^{m}$$

که در آن r، بردار مانده $b - A\hat{x}$ است و $\hat{x}$ جواب تقریبی در تکرار mام است، همچنین $\kappa \equiv \frac{\lambda_n}{\lambda_۱}$ عدد شرطی است که برابر نسبت بزرگترین مقدار ویژه به کوچکترین مقدار ویژه است. بنابراین اگر یک مقدار ویژهٔ بی‌نهایت کوچک وجود داشته باشد همگرایی معمولاً کند خواهد بود. اگر ماتریس A نزدیک به نرمال باشد همگرایی GMRES مشابه با همگرایی روش گرادیان مزدوج است. باز هم وجود مقادیر ویژه کوچک سرعت همگرایی روش را کاهش می‌دهند. فرض کنید A دارای تجزیه طیفی به‌شکل $A = Z\Lambda Z^{-۱}$ باشد و همهٔ مقادیر ویژه A حقیقی و مثبت باشند. فرض کنید حدس اولیه $x_{۰}$ برابر با صفر باشد، خواهیم داشت:

$$\frac{\| r \|}{\| b \|} \leq ۲ \| Z \| \| Z^{-۱} \| \left(۱ - \frac{۲}{\sqrt{k}+۱} \right)^{m} \qquad (۱۶.۱)$$

(برای نتایج مشابه و کلی‌تر مرجع [۲۸] را ملاحظه کنید). دوباره $\kappa \equiv \frac{\lambda_n}{\lambda_۱}$، ولی اینجا لزوماً با عدد شرطی استاندارد یکی نیست. برای ماتریس‌های غیر نرمال سخت، خواص همگرایی پیچیده‌تر خواهد بود. تجزیه تحلیل‌های زیادی در این مورد انجام شده اند، به‌ویژه برای هنگامی‌که همه مقادیر ویژه درون بیضی‌ای قرار می‌گیرند که شامل مبدأ نمی‌باشد (مراجع [۱۵]، [۸] و [۲۷] را ملاحظه کنید).

۳.۵.۱ GMRES با شروع مجدد

الگوریتم GMRES، با بزرگ شدن m غیرعملی می‌شود زیرا حافظه و محاسبات مورد نیاز با بزرگ شدن m افزایش می‌یابد برای حل این مشکل از شروع مجدد استفاده می‌کنند.

Algorithm 1·6 Restarted GMRES (GMRES(m))

1. Compute $r_0 = b - Ax_0$, $\beta = \| r_0 \|_2$, and $v_1 = r_0/\beta$
2. Generate the Arnoldi basis and the matrix $\bar{H}_m$ using the Arnoldi algorithm starting with v_1
3. Compute y_m, which minimizes $\| \beta e_1 - \bar{H}_m y \|_2$, and $x_m = x_0 + V_m y_m$
4. If satisfied then stop, else set $x_0 = x_m$ and go to 1

زمانی که ماتریس معین مثبت نباشد، یک مشکل عمدهٔ GMRES با شروع مجدد همگرایی تضمین نشدهٔ آن است. درحالی‌که همگرایی GMRES منظم در حداکثر n مرحله تضمین می‌شود. ولی اگر گام‌های زیادی برای همگرایی نیاز باشد الگوریتم غیرعملی خواهد بود. یک راه حل این مشکل پیش شرط سازی است[۴، ۶] که هدف آن کاهش تعداد مراحل مورد نیاز برای همگرایی است. در فصل‌های بعد برای بهبود دقت و همگرایی GMRES روش‌هایی ارائه خواهد شد.

۶.۱ مسأله کمترین توان‌های دوم

در روش‌های حل دستگاه خطی $Ax = b$ معمولاً فرض می‌شود که ماتریس A مربعی و نامنفرد باشد، ولیکن در برخی وضعیت‌های عملی نظیر کاربردهای آماری، مدل‌سازی هندسی، و پردازش سیگنال، نیاز به حل یک دستگاه داریم که در آن ماتریس A نامربعی و یا منفرد است. در چنین حالت‌هایی ممکن است به هیچ وجه جواب وجود نداشته باشد. در حالت‌هایی که جواب یافت می‌شود، ممکن است بی‌نهایت جواب وجود داشته باشد. برای مثال هنگامی‌که A یک ماتریس $m \times n$ با $m > n$ است، یک دستگاه فرامعین داریم، یعنی تعداد معادلات بیشتر از تعداد مجهولات است، و یک دستگاه فرامعین معمولاً جواب ندارد. برعکس یک دستگاه فرومعین $m < n$ معمولاً یک تعداد نامتناهی جواب دارد.