بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه فردوسی مشهد

عنوان

روش‌های تکراری برای حل مسأله کمترین توان‌های دوم

استاد راهنما

دکتر فائزه توتونیان

استاد مشاور

دکتر علیرضا سهیلی

نگارنده

زهرا کارگر

زمستان ۱۳۹۲

بسمه تعالی

مشخصات پایان‌نامه تحصیلی دانشجویان

دانشگاه فردوسی مشهد

عنوان: روش‌های تکراری برای حل مسأله کمترین توان‌های دوم

نام نویسنده: زهرا کارگر

استاد راهنما: دکتر فائزه توتونیان

استاد مشاور: دکتر علیرضا سهیلی

دانشکده: علوم ریاضی گروه: ریاضی کاربردی	رشته تحصیلی: آنالیز عددی
تاریخ تصویب: ۱۳۹۲/۲/۳۰	تاریخ دفاع: ۱۳۹۲/۱۱/۱۰
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد	تعداد صفحات: ۱۰۰

چکیده پایان‌نامه :

مسأله کمترین توان‌های دوم یکی از مهم‌ترین مسائل در آنالیز عددی است.

در این پایان‌نامه به بررسی روش‌های تکراری CGNR ، CGNE، LSQR، BA-GMRES و AB-GMRES برای حل مسأله کمترین توان‌های دوم می‌پردازیم. همچنین پیش شرط سازی این روش‌های تکراری را با پیش شرط مقیاس‌بندی قطری و RIF ارائه می‌دهیم و نشان می‌دهیم روش‌های AB-GMRES (BA-GMRES) و CGNE (CGNR) پیش شرط شده رفتار همگرای مشابهی برای مسائل فرومعین (فرامعین) دارند.

در پایان، با مثال‌های عددی برای مسائل فرامعین و فرومعین نشان می‌دهیم که روش‌های GMRES پیش شرط شده با RIF سریع‌تر از سایر روش‌های تکراری به جواب مسأله کمترین توان‌های دوم همگرا می‌شوند.

واژگان کلیدی: مسأله کمترین توان‌های دوم، ماتریس تنک، روش زیرفضای کریلف، روش‌های CG، GMRES، LSQR، LSMR

امضای استاد راهنما: تاریخ:

اظهارنامه

عنوان پایان‌نامه : روش‌های تکراری برای حل مسأله کمترین توان‌های دوم

اینجانب زهرا کارگر دانشجوی دوره کارشناسی ارشد دانشکده علوم ریاضی دانشگاه فردوسی مشهد نویسنده پایان‌نامه تحت راهنمایی دکتر فائزه توتونیان متعهد می‌شوم:

آ. تحقیقات در این رساله توسط اینجانب انجام شده و از صحت و اصالت برخوردار است.

ب. در استفاده از نتایج پژوهش‌های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.

ج. مطالب مندرج در این پایان‌نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی به جایی ارائه نشده است.

د. کلیه حقوق این اثر متعلق به دانشگاه فردوسی مشهد است و مقالات مستخرج با نام ''دانشگاه فردوسی مشهد '' و یا ''Ferdowsi University of Mashhad'' به چاپ خواهد رسید.

ه. حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی رساله تاثیرگذار بوده‌اند در مقالات مستخرج از آن رعایت شده است.

و. در کلیه مراحل انجام این رساله، در مواردی که از موجود زنده(یا بافت‌های آن‌ها) استفاده شده، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.

ز. در کلیه مراحل انجام این رساله، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده، اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاقی انسانی رعایت شده است.

تاریخ
امضای دانشجو

تقدیم به

ساحت مقدس آفتاب توس

هم او که وجودش دلیلی بود برای آمدن و بهانه ای برای ماندن...

و اسوه های زندگیم و امید بودنم،

پدر و مادر عزیزم

که زیبایی وجودشان تمام هستی من و دعای خیرشان همواره راهگشای زندگیم بوده است.

خدایا...[1]

به من زیستنی عطا کن که در لحظه مرگ، بر بی‌ثمری لحظه‌ای که برای زیستن گذشته است، حسرت نخورم و مُردنی عطا کن که بر بیهودگیش، سوگوار نباشم. بگذار تا آن را، خود انتخاب کنم، اما آنچنان که تو دوست می‌داری.

تو می‌دانی و همه می‌دانند که شکنجه دیدن بخاطر تو، زندانی کشیدن بخاطر تو و رنج بردن به پای تو تنها لذت بزرگ زندگی من است، از شادی توست که من در دل می‌خندم، از امید رهایی توست که برق امید در چشمان خسته‌ام می‌درخشد و از خوشبختی توست که هوای پاک سعادت را در ریه‌هایم احساس می‌کنم. نمی‌توانم خوب حرف بزنم. نیروی شگفتی را که در زیر کلمات ساده و جمله‌های ضعیف و افتاده، پنهان کرده‌ام دریاب، دریاب.

تو می‌دانی و همه می‌دانند که زندگی از تحمیل لبخندی بر لبان من، از آوردن برق امیدی در نگاه من، از برانگیختن موج شعفی در دل من، عاجز است.

تو، چگونه زیستن را به من بیاموز، چگونه مردن را خود خواهم آموخت.

به من توفیق تلاش در شکست، صبر در نومیدی، رفتن بی‌همراه، جهاد بی‌سلاح، کار بی‌پاداش، فداکاری در سکوت، دین بی‌دنیا، مذهب بی‌عوام، عظمت بی‌نام، خدمت بی‌نان، ایمان بی‌ریا، خوبی بی‌نمود، گستاخی بی‌خامی، قناعت بی‌غرور، عشق بی‌هوس، تنهایی در انبوه جمعیت، و دوست داشتن بی‌آنکه دوست بداند، روزی کن.

اگر تنهاترین تنهاشوم، باز هم خدا هست

او جانشین همه نداشتن‌هاست...

[1] مناجاتی از دکتر علی شریعتی.

سپاس گزاری...

حمد و سپاس بی‌کران خداوند کریم را که نخستین و بزرگترین یاری‌گر بندگان است.

در آغاز وظیفه‌ی خود می‌دانم از زحمات بی‌دریغ استاد راهنمای خود سرکار خانم دکتر فائزه توتونیان صمیمانه تشکر و قدردانی کنم که از راهنمایی‌های ارزنده ایشان در راستای پیشبرد پژوهش حاصل بهره فراوان بردم و همواره شاگرد مکتب علم و انسانیت و منش والای ایشان هستم.

از جناب آقای دکتر علیرضا سهیلی که زحمت مطالعه و مشاوره این پایان‌نامه را تقبل فرمودند و در آماده‌سازی این پایان‌نامه به نحو احسن اینجانب را مورد راهنمایی قرار دادند، کمال امتنان را دارم.

همچنین لازم می‌دانم از اساتید فرهیخته جناب آقای دکتر اصغر کرایه‌چیان و جناب آقای دکتر مرتضی گچ‌پزان که داوری این پایان‌نامه را به عهده گرفتند با تمام وجود تشکر و قدردانی نمایم.

در پایان، بوسه می‌زنم بر دستان خداوندگاران مهر و مهربانی، پدر و مادر عزیزم و بعد از خدا، ستایش می‌کنم وجود مقدس‌شان را که در این سردترین روزگاران، بهترین پشتیبان من بودند.

زهرا کارگر
زمستان ۱۳۹۲

فهرست مطالب

فهرست جدول‌ها

فهرست شکل‌ها

پیشگفتار

مسائل کمترین توان‌های دوم در ریاضیات از اهمیت فراوانی برخوردارند. همچنین در علوم مختلف از جمله فیزیک، اقتصاد، شیمی و داروسازی به کار می‌روند.

مسأله کمترین توان‌های دوم

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_{۲} \tag{۱}$$

که در آن $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ و $m \geq n$ یا $m < n$ را در نظر می‌گیریم، این مسأله معادل

$$A^T Ax = A^T b \tag{۲}$$

می‌باشد، برای $m < n$ دستگاه

$$AA^T y = b, \qquad x = A^T y \tag{۳}$$

جواب مینیمم نرم رابطه (۲) را ارائه می‌دهد. روش مستقیم استانداردی که برای حل مسأله کمترین توان های دوم (۱) (که در آن $m \geq n$ و A رتبه کامل است) استفاده می‌شود، تجزیه QR، $A = QR$ است که در آن $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ یک ماتریس متعامد و $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$ یک ماتریس بالا مثلثی است. این تجزیه می‌تواند با استفاده از تبدیلات هاوس هولدر یا گیونز یا گرام اشمیت اصلاح شده به دست آید. بنابراین معادله (۲) به دستگاه $R^T Rx = R^T Q^T b$ تبدیل می‌شود. اگر $\mathrm{rank}A = n$ باشد، R نامنفرد است در نتیجه $Rx = Q^T b$ و جایگذاری پسرو جواب کمترین توان‌های دوم (۲) را ارائه می‌دهد. وقتی که A بزرگ و تنک است، از تکنیک‌هایی استفاده می‌شود که بتوان در حافظه و زمان محاسبات صرفه جویی کرد [۵]. ولیکن برای مسائل بزرگ و تنک، روش‌های تکراری ضروری هستند. از میان آن‌ها روش کمترین توان های دوم گرادیان مزدوج CG[1]، روش LSQR[2] [۱۴]، روش LSMR[3] [۷] و روش GMRES[4] [۹] بیشتر استفاده می‌شوند.

سرعت همگرایی روش‌های تکراری بستگی به عدد شرطی ماتریس ضرایب دارد بنابراین همگرایی

[1] Conjugate Gradient

[2] Linear Least Squares with QR factorization

[3] Linear Least Squares Minimul Residual

[4] Generalized Minimal Residual Method

روش‌های تکراری ممکن است برای مسائل بد وضع کند باشد. به‌منظور افزایش سرعت همگرایی روش‌های تکراری می‌توان از پیش شرط سازی استفاده نمود.

روش تکراری LSQR برای حل مسأله کمترین توان‌های دوم توسط کریستوفر پیج[1] و مایکل ساندرز[2] در سال ۱۹۸۲ مطرح شد، این روش بر اساس رویه‌ی دوقطری سازی گولاب-کاهان[3] پایه ریزی شده است و از لحاظ تئوری معادل روش گرادیان مزدوج استاندارد است هنگامی‌که برای مسأله کمترین توان‌های دوم به کاربرده می‌شود.

روش تکراری GMRES برای حل مسأله کمترین توان‌های دوم توسط هایامی[4]، جان-فنگ- یین[5] و توکوشی ایتو[6] در سال ۲۰۰۷ مطرح شد. آن‌ها دو روش برای اعمال روش GMRES برای مسائل کمترین توان‌های دوم خطی با ماتریس ضرایب A و استفاده از یک ماتریس B ارائه دادند. اولین روش استفاده از GMRES برای به دست آوردن جواب $\min\limits_{z\in\mathbb{R}^m} \|b - ABz\|_2$ است و دومین روش استفاده از GMRES برای به دست آوردن جواب $\min\limits_{x\in\mathbb{R}^n} \|Bb - BAx\|_2$ می‌باشد.

روش تکراری LSMR برای حل مسأله کمترین توان‌های دوم توسط دیوید چین-لانگ فونگ[7] و مایکل ساندرز در سال ۲۰۱۱ مطرح شد، این روش نیز مشابه روش LSQR براساس رویه‌ی دوقطری سازی گولاب-کاهان پایه ریزی شده است و از لحاظ تئوری معادل روش MINNRES به‌کار رفته برای معادله نرمال $A^TAx = A^Tb$ است.

در این پایان‌نامه این روش‌ها را برای حل مسائل کمترین توان های دوم از لحاظ تئوری و عددی مورد بررسی قرار می‌دهیم و آن ها را با هم از لحاظ زمان محاسبات و دقت جواب مقایسه می‌کنیم.

در فصل اول روش تکراری CG و GMRES را ارائه می‌دهیم و همچنین CG پیش شرط سازی شده و GMRES پیش شرط سازی شده را بیان می‌کنیم، سپس پیش شرط RIF [8] [۴] را معرفی می‌نماییم.

در فصل دوم روش‌های تکراری LSQR، CGNR و CGNE را ارائه می‌دهیم و همگرایی این روش‌ها را با هم مقایسه می‌کنیم.

---

1. Cheristopher C. Paige
2. Michael A. Saunders
3. Golub and Kahan
4. Ken Hayami
5. June-Feng Yin
6. Tokoushi Ito
7. David Chin-Lung Fong
8. Robust Incomplete Factorization

در فصل سوم روش تکراری LSMR را معرفی می‌کنیم و همگرایی این روش را با روش LSQR مقایسه می‌کنیم.

در فصل چهارم روش‌های تکراری $AB - GMRES$ و $BA - GMRES$ را بیان می‌کنیم و همگرایی $AB - GMRES$ پیش شرط سازی شده و $BA - GMRES$ پیش شرط سازی شده با دو پیش شرط RIF و مقیاس‌بندی قطری را با روش‌های ارائه شده در فصل‌های قبل مقایسه می‌کنیم.

در پایان نتیجه‌گیری نموده و پیشنهاداتی در مورد تحقیقات آینده مطرح می‌نماییم.

فصل ۱

روش‌های تکراری زیرفضای کریلف و پیش شرط سازی آن‌ها

مقدمه

در این فصل ابتدا دو روش استاندارد CG و GMRES را برای حل دستگاه معادلات خطی معین مثبت و نامعین بیان می‌نماییم سپس پیش شرط سازی روش‌های تکراری همراه با روش‌های تکراری CG و GMRES پیش شرط شده را ارائه می‌دهیم. در پایان پیش شرط RIF را برای پیش شرط سازی معادلات نرمال بیان می‌کنیم.

۱.۱ نمادگذاری

در این پایان‌نامه ماتریس ها با A، B،... بردارها با v،w،... و اسکالرها با α، β،... نمایش داده می‌شوند. دو مورد استثنا s و c هستند که عناصر با معنای یک ماتریس متعامد ابتدایی را نشان می‌دهند. به‌طوری که $c^۲ + s^۲ = ۱$. برای یک بردار v، $\|v\|$ همیشه نرم اقلیدسی $\|v\|_۲ = (v^Tv)^{۱/۲}$ را نشان می‌دهد برای یک ماتریس A، $\|A\|$ معمولا نرم فروبینوس $\|A\|_F = (\sum \alpha_{ij}^۲)^{۱/۲}$ را تعریف می‌کند و عدد شرطی برای ماتریس نامتقارن A با $\mathrm{cond}(A) = \|A\|\|A^+\|$ تعریف می‌شود که در آن A^+ شبه معکوس A را نشان می‌دهد، همچنین $R(A)$، برد ماتریس A و $N(A)$ فضای پوچ A را نشان می‌دهند.

۲.۱ زیرفضای کریلف

یک روش کلی برای حل دستگاه معادلات خطی $Ax = b$، به دست آوردن یک جواب تقریبی x_m از زیرفضای آفین $x_۰ + \mathcal{K}_m$ با بعد m، با اعمال شرایط پتروف گالرکین زیر است

$$b - Ax_m \perp \mathcal{L}_m$$

که در آن $\mathcal{L}_m$ زیرفضای دیگری با بعد m است. در اینجا $x_۰$ نشان دهنده ی یک حدس اولیه دلخواه برای جواب است. یک روش زیرفضای کریلف [1] روشی است که برای آن زیرفضای $\mathcal{K}_m$ زیرفضای کریلف زیر است.

$$\mathcal{K}_m(A, r_۰) = \mathrm{span}\{r_۰, Ar_۰, \ldots, A^{m-۱}r_۰\} \tag{۱.۱}$$

[1]krylov subspace

که در آن $r_0 = b - Ax_0$، $\mathcal{K}_m(A, r_0)$ را توسط $\mathcal{K}_m$ نشان می‌دهیم. روشن است که تقریب های به دست آمده از روش زیرفضای کریلف به صورت زیر می‌باشند.

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

که در آن q_{m-1} یک چند جمله ای از درجه $m - 1$ است. در ساده‌ترین حالت که $x_0 = 0$، داریم

$$A^{-1}b \approx q_{m-1}(A)b$$

به عبارت دیگر $A^{-1}b$ توسط $q_{m-1}(A)b$ تقریب زده می‌شود.

در اینجا روش‌های تصویری را روی زیرفضای کریلف بررسی می‌کنیم، یعنی زیرفضاهایی به شکل

$$\mathcal{K}_m(A, v) = \operatorname{span}\{v, Av, A^2v, \ldots, A^{m-1}v\} \tag{۱.۲}$$

که توسط $\mathcal{K}_m$ نمایش داده می‌شوند اگر ابهامی وجود نداشته باشد. بعد زیرفضای تقریب‌ها در هر گام فرایند تصویری ۱ واحد افزایش می‌یابد. چند ویژگی اولیه از زیرفضای کریلف را می‌توان بیان کرد. اولین ویژگی این است که $\mathcal{K}_m$ زیرفضای همه بردارهایی در $\mathbb{R}^n$ است که می‌توانند به صورت $x = p(A)v$ نوشته شوند، که در آن p یک چندجمله‌ای از درجه کمتر یا مساوی $m - 1$ است.

یادآوری می کنیم که چندجمله ای مینیمال یک بردار v، یک چندجمله ای تکین غیرصفر p از کمترین درجه است به طوری که $p(A)v = 0$. درجه چندجمله ای مینیمال v نسبت به A درجه v نسبت به A نامیده می‌شود. یا به طور ساده اگر ابهامی وجود نداشته باشد درجه v نامیده می‌شود. یک نتیجه از قضیه کیلی-هامیلتون این است که درجه v از n تجاوز نمی‌کند. گزاره زیر به آسانی ثابت می‌شود . [مرجع [۱۸] را ملاحظه کنید] فرض کنید μ درجه v باشد، آنگاه $\mathcal{K}_\mu$ تحت A پایا است و $\mathcal{K}_m = \mathcal{K}_\mu$ برای همه $m \geq \mu$.

گزاره فوق بیان می کند که بعد $\mathcal{K}_m$ ناکاهشی است. گزاره زیر بعد $\mathcal{K}_m$ را در حالت کلی مشخص می‌کند. [مرجع [۱۸] را ملاحظه کنید] زیرفضای کریلف $\mathcal{K}_m$ از بعد m است اگر و تنها اگر درجه μ بردار v نسبت به A کمتر از m نباشد، یعنی

$$\dim(\mathcal{K}_m) = m \qquad \longleftrightarrow \qquad \operatorname{grade}(v) \geq m \tag{۱.۳}$$

بنابراین

$$\dim(\mathcal{K}_m) = \min\ \{m, \mathrm{grade}(v)\} \qquad (۴.۱)$$

۳.۱ روش آرنولدی

روش آرنولدی یک روش تصویری متعامد روی $\mathcal{K}_m$ برای ماتریس‌های غیرهرمیتی است. این روش اولین بار در سال ۱۹۵۱ به عنوان راه حلی برای کاهش یک ماتریس متراکم به شکل هسنبرگی معرفی شد. آرنولدی اشاره کرد که مقادیر ویژه ماتریس هسنبرگی به دست آمده از یک تعداد گام کوچکتر از n می‌توانند تقریب‌های دقیقی برای برخی مقادیر ویژه ماتریس‌های اصلی فراهم سازند. بعدها معلوم شد که این استراتژی منجر به یک فن کارا برای تقریب زدن مقادیر ویژه ماتریس‌های بزرگ وتنک می‌شود. روش ابتدا به طور نظری یعنی با فرض حساب دقیق توصیف خواهد شد، سپس پیاده سازی عملی آن ارائه می‌گردد.

۱.۳.۱ الگوریتم پایه‌ای

رویه آرنولدی یک الگوریتم برای ساختن یک پایه یکا متعامد از زیرفضای کریلف $\mathcal{K}_m$ است.

الگوریتم ۱.۱: روش آرنولدی

1. Choose a vector v_1 such that $\|v_1\|_2 = 1$
2. For $j = 1,\ 2, \ldots,\ m$ Do
3. Compute $h_{i,j} = (Av_j, v_i)$ for $i = 1,\ 2,\ \ldots,\ j$
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. End Do

در هر گام، الگوریتم بردار آرنولدی قبلی v_j را در A ضرب می‌کند، سپس بردار حاصل w_j را نسبت به

تمام v_i های قبلی توسط یک فرایند گرام-اشمیت استاندارد یکا متعامد می‌سازد. اگر بردار w_j محاسبه شده در خط ۴ صفر شود، الگوریتم متوقف خواهد شد. اکنون چند خاصیت از الگوریتم را در قضیه‌های زیر که در مرجع [۱۸] ثابت شده‌اند، بیان می‌کنیم. [مرجع [۱۸] را ملاحظه کنید] فرض کنید الگوریتم آرنولدی قبل از m-امین گام متوقف نشود. آنگاه بردارهای $v_۱$، $v_۲$، ...، v_m یک پایه یکا متعامد از زیرفضای کریلف زیر را تشکیل می‌دهند.

$$\mathcal{K}_m = \mathrm{span}\{v_۱, Av_۱, \ldots, A^{m-۱}v_۱\}$$

[مرجع [۱۸] را ملاحظه کنید] اگر V_m ماتریس $n \times m$ با بردارهای ستونی $v_۱, \ldots, v_m$ را نشان دهد، $\bar{H}_m$ ماتریس بالا هسنبرگی $(m+۱) \times m$ را نمایش دهد که درایه های غیرصفر آن h_{ij} توسط الگوریتم آرنولدی تعریف شوند و H_m ماتریس به دست آمده از حذف آخرین سطر $\bar{H}_m$ باشد. آنگاه روابط زیر برقراراند:

$$AV_m = V_mH_m + w_me_m^T \tag{۵.۱}$$

$$= V_{m+۱}\bar{H}_m \tag{۶.۱}$$

$$V_m^TAV_m = H_m \tag{۷.۱}$$

[مرجع [۱۸] را ملاحظه کنید] الگوریتم آرنولدی در گام j با شکست مواجه می شود. (یعنی در خط ۵ از الگوریتم آرنولدی $h_{j+۱,j} = ۰$) اگر و تنها اگر چند جمله ای مینیمال $v_۱$ از درجه j باشد.

۲.۳.۱ پیاده سازی عملی

در توضیحات قبلی روش آرنولدی، برای سادگی فرض شده است که محاسبات دقیق می‌باشند. در عمل می توان از گرام-اشمیت اصلاح شده یا الگوریتم هاوس هولدر به جای الگوریتم گرام اشمیت استاندارد استفاده کرد. با جایگزینی گرام اشمیت اصلاح شده داریم:

الگوریتم ۲.۱: آرنولدی با گرام اشمیت اصلاح شده

1. Choose a vector v_1 of norm 1
2. For $j = 1, \ldots, m$ Do:
3. Compute $w_j := Av_j$
4. For $i = 1, \ldots, j$ Do:
5. $h_{ij} = (w_j, v_i)$