3 Minimointitehtävän ratkaisuista

3.1. Johdanto

Minimointitehtävä : (Malliprobleema)

$$\min_{\eta \in \mathbb{R}^M} f(\eta), \qquad (M)$$

missä $f : \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}$ on kvadraattinen funktio

$$f(\eta) = \frac{1}{2} \eta \cdot A\eta - b \cdot \eta \qquad \left(= \frac{1}{2} \eta^T A \eta - b^T \eta \right),$$

missä A on harva, positiividefiniitti matriisi $(M \times M)$ ja $b \in \mathbb{R}^M$.

Suoran ratkaisun $(Ax = b)$ sijaan tarkastelemme iteratiivisia menetelmiä.

<u>Määritelmä 3.1.1.</u> Minimointialgoritmi malliprobleemalle

Olkoon tarkka ratkaisu (M):lle ξ. Olkoon alkuarvaus ξ^0; etsi approksimaatiot ξ^k, $k = 1, 2, \dots,$ muotoa

$$\xi^{k+1} = \xi^k_i + \alpha_k d^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

missä d^k on suunta $\in \mathbb{R}^M$ ja $\alpha_k > 0$ on askelpituus.

Eri menetelmät eroavat suunnan ja askelpituuden valinnan osalta; tässä tarkastelemme gradienttimenetelmää ja (pohjustettua) konjugaattigradienttimenetelmää.

Hieman notaatiota: $g : \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}$ (sileä)

$$g' = \nabla g = \left(\frac{\partial g}{\partial \eta_1} \cdots \frac{\partial g}{\partial \eta_M} \right)$$

$$g'' = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial^2 \eta_1} & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial \eta_1 \partial \eta_M} \\ \vdots & & \\ \frac{\partial^2 g}{\partial \eta_M \partial \eta_1} & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial^2 \eta_M} \end{pmatrix} \text{ on Hessen matriisi.}$$

Malliprobleeman kvadraattiselle funktiolle :

$$f'(\eta) = A\eta - b$$

$$f''(\eta) = A$$

Approksimaatioille ξ^k saadaan Taylorin kaavasta

$$g(\xi^{k+1}) = g(\xi^k) + \alpha_k g'(\xi^k) \cdot d^k + \frac{\alpha_k^2}{2} d^k \cdot g''(\eta)\, d^k$$

Jos Hessen matriisin alkiot ovat rajoitettuja (η viivalla $\xi^k \to \xi^{k+1}$)
ξ^k:n ympäristössä, saadaan

$$g(\xi^{k+1}) = g(\xi^k) + \alpha_k g'(\xi^k) \cdot d^k + \Theta(\alpha_k^2), \quad \text{kun } \alpha_k \to 0 .$$

Havaitaan, että jos $g'(\xi^k) \cdot d^k < 0$, niin $g(\xi^{k+1}) < g(\xi^k)$,
mikäli α_k on riittävän pieni.

Erityisesti, valitsemalla $d^k = -g'(\xi^k)$, $g'(\xi^k) \neq 0$, saadaan gradienttimenetelmä.

Askelpituus α_k saadaan minimoimalla : $\min\limits_{\alpha \geq 0} g(\xi^k + \alpha d^k)$,
jolloin saadaan optimaalinen askelpituus α_k.

Suoritetaan 1D-viivahaku : $\frac{d}{d\alpha} g(\xi^k + \alpha d^k) = 0$,
missä optimaaliselle α: $g'(\xi^{k+1}) \cdot d^k = 0$.

Malliprobleemalle (M) :

$$0 = f'(\xi^k + \alpha_k d^k) \cdot d^k = (A(\xi^k + \alpha_k d^k) - b) \cdot d^k$$

$$= (A\xi^k - b) \cdot d^k + \alpha_k d^k \cdot A d^k$$

$$\Rightarrow \alpha_k = -\frac{(A\xi^k - b) \cdot d^k}{d^k \cdot A d^k}$$

Suppenemisvauhti (tai -nopeus)

Olemme kiinnostuneita arvioimaan alkuarvauksen virheen so. $\xi - \xi^0$:n pienenemistä iteraation edetessä.

Osoittautuu, että suppenemisnopeutta voi arvioida matriisin häiriöalttiuden, $K(A)$, avulla. Tässä

$$K(A) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}.$$

Tyypillisesti: Poisson : $K(A) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{h^2}\right)$

Laatta : $K(A) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{h^4}\right)$

Muistetaan: $\lambda_{min} = \min\limits_{\substack{\eta \in \mathbb{R}^M \\ \eta \neq 0}} \frac{\eta \cdot A\eta}{\|\eta\|^2}$; λ_{max} vastaavasti

Matriisinormi: $|B| = \max\limits_{\substack{\eta \in \mathbb{R}^M \\ \eta \neq 0}} \frac{\|B\eta\|}{\|\eta\|}$ (tässä $|B| = \max\limits_{j} |\lambda_j|$)

3.2. Gradienttimenetelmä

Analysoidaan suppenemista, kun askelpituus α on vakio.

$$\begin{cases} \xi^{k+1} = \xi^k + \alpha d^k, & k = 0, 1, \ldots \\ d^k = -f'(\xi^k) = -(A\xi^k - b) \end{cases}$$

$\alpha > 0$ ja riittävän pieni.

Mitä riittävän pieni tarkoittaa?

Olkoon ξ tarkka ratkaisu eli $A\xi = b$. Tällöin $\xi = \xi - \alpha(A\xi - b)$ joten virheelle $e^k = \xi - \xi^k$ saadaan ehto:

$$e^{k+1} = (I - \alpha A) e^k, \quad k = 0, 1, \ldots$$

eli $\|e^{k+1}\| \leq |I - \alpha A| \, \|e^k\|$

Jotta iteraatio suppenisi, tarvitaan ehto

$$|I - \alpha A| \equiv \gamma < 1 .$$

Määritelmän mukaan : $|I - \alpha A| = \max_j |I - \alpha \lambda_j|$

Koska A on pos.def. on välttämättä

$$1 - \alpha \lambda_j > -1 , \quad j = 1, \dots, M .$$

α on valittava s.e. $\alpha \lambda_{max} < 2$; valitaan $\alpha = \frac{1}{\lambda_{max}}$, jolloin

$$|I - \alpha A| = 1 - \frac{\lambda_{min}}{\lambda_{max}} = 1 - \frac{1}{K(A)} .$$

Virheelle : $\|e^{k+1}\| \leq \gamma \|e^k\|$, $\gamma = 1 - \frac{1}{K(A)}$

eli $\|e^{k+1}\| \leq \gamma^k \|e^0\|$.

Montako askelta tarvitaan ?

Olkoon toleranssi $\varepsilon > 0$. Edellisen nojalla siis

$$\left(1 - \frac{1}{K(A)}\right)^n \leq \varepsilon$$

eli $-n \log\left(1 - \frac{1}{K(A)}\right) \geq \log \frac{1}{\varepsilon}$ $\quad (-\log(1-x) > x , \; x < 1)$

eli $n \geq K(A) \log \frac{1}{\varepsilon}$

Jos tyypillisellä Poisson-tyyppisellä tehtävällä on $K(A) = \Theta\left(\frac{1}{h^2}\right)$, on myöskin $n = \Theta\left(\frac{1}{h^2}\right)$ eli varsin suuri.

Jatketaan analyysiä ominaisarvojen avulla :

$$A \psi_j = \lambda_j \psi_j , \quad j = 1, \dots, M .$$

Ominaisvektorit ψ_j muodostavat kannan, missä virheen esitys on

$$e^k = \sum_{j=1}^{M} e^k_j \psi_j , \quad e^k_j = e^k \cdot \psi_j$$

Komponenteittain : $e_j^{k+1} = \left(1 - \frac{\lambda_j}{\lambda_{max}}\right) e_j^k$, $j = 1, 2, \dots, M$, $\alpha = 1/\lambda_{max}$

Havainto: Suhteellisesti suurille λ_j virheenvaimennuskerroin on suuri, kun taas pienille vaimennus on pieni (≈ 1).

Gradienttimenetelmälle on ominaista, että korkean taajuuden virheet "hioutuvat" nopeasti, mutta matalat taajuudet joskus hyvin hitaasti. Tätä käytetään usein hyväksi ja aivan erityisesti ns. multi-grid menetelmissä.

3.3. Konjugaattigradienttimenetelmä

Idea: askelpituus α_k on optimaalinen ja suunnat d^k ovat A-konjugaatteja, ts. $d^i \cdot A d^j = 0$, $i \neq j$.

Määritellään sisätulo $\langle \xi, \eta \rangle = \xi \cdot A\eta$, A pos. def, $\xi, \eta \in \mathbb{R}^M$, joten edellä oleva ehto on $\langle d^i, d^j \rangle = 0$, $i \neq j$.

Energianormi: $\|\eta\|_A = \langle \eta, \eta \rangle^{1/2}$, $\eta \in \mathbb{R}^M$.

<u>Algoritmi 3.3.1.</u>

Olkoon $\xi^0 \in \mathbb{R}^M$ annettu ja $d^0 = -r^0$. Etsi ξ^k ja d^k, $k = 1, 2, \ldots$, s.e.

$$\xi^{k+1} = \xi^k + \alpha_k d^k \qquad (a)$$

$$\alpha_k = -\frac{r^k \cdot d^k}{\langle d^k, d^k \rangle} \qquad (b)$$

$$d^{k+1} = -r^{k+1} + \beta_k d^k \qquad (c)$$

$$\beta_k = \frac{\langle r^{k+1}, d^k \rangle}{\langle d^k, d^k \rangle} \qquad (d)$$

missä $r^k = f'(\xi_k) = A\xi^k - b$.

Aputuloksia

Lemma 3.3.2 $\quad \mathrm{span}\{d^0, d^1, \ldots, d^m\} = \mathrm{span}\{r^0, \ldots, r^m\}$

$$= \mathrm{span}\{r^0, Ar^0, \ldots, A^m r^0\}$$

Lemma 3.3.3 $\quad \langle d^i, d^j \rangle = 0, \quad i \neq j.$

$$r^i \cdot r^j = 0, \quad i \neq j.$$

Lause 3.3.4 $\quad$ On olemassa $m \leq M$ s.e. $A\xi^m = b$.

Huomaa, että tarkassa aritmetiikassa konjugaattigradienttimenetelmää voi ajatella suorana menetelmänä.

Analysoidaan menetelmää samoin kuin edellä gradienttimenetelmä. Kaikille $k = 0, 1, \ldots,$ pätee $\xi^k - \xi^0 = \sum_{j=0}^{k-1} \alpha_j d^j$, Lemma 3.3.3 antaa

$$\langle \xi^k, d^k \rangle = \langle \xi^0, d^k \rangle, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Tämä on hyödyllinen aputulos, sillä koska $A\xi = b$, pätee

$$-r^k \cdot d^k = -(A\xi^k - A\xi) \cdot d^k = \langle \xi - \xi^k, d^k \rangle = \langle \xi - \xi^0, d^k \rangle,$$

mistä
$$\alpha_k = \frac{\langle \xi - \xi^0, d^k \rangle}{\langle d^k, d^k \rangle}.$$

α_k:iden avulla saadaan siis identiteetti:

$$\langle \xi^k - \xi^0, d^j \rangle = \langle \xi - \xi^0, d^j \rangle, \quad j = 0, 1, \ldots, k-1.$$

Nähdään, että $\xi^k - \xi^0$ on alkuarvauksen virheen $\xi - \xi^0$ projektio avaruuteen $W_k = \mathrm{span}\{d^0, \ldots, d^{k-1}\}$.

Virheelle pätee siis:

$$\|\xi - \xi^k\|_A = \|\xi - \xi^0 - (\xi^k - \xi^0)\|_A \leq \|\xi - \xi^0 - \eta\|_A$$
$$\forall \eta \in W_k$$

Lopulta, $r^0 = A\xi^0 - A\xi = -A(\xi - \xi^0)$, joten

$$W_k = \text{span}\{r^0, Ar^0, \dots, A^{k-1}r^0\} = \text{span}\{A(\xi-\xi^0), \dots, A^k(\xi-\xi^0)\}$$

<u>Lause 3.3.5</u>

$$\|\xi - \xi^k\|_A \le \|p_k(A)(\xi - \xi^0)\|_A \le \max_j |p_k(\lambda_j)| \, \|\xi - \xi^0\|_A$$

p_k polynomi, jonka kerroin $\beta_0 = 1$.

Virheenvaimennuskerroin $\gamma_k \le \left(\frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1}\right)^k$, $k = 0, 1, 2, \dots$, (*)

ja iteraatioaskelten lukumääräksi annetulla toleranssilla ε:

$$n \ge \frac{1}{2}\sqrt{\kappa(A)} \log \frac{2}{\varepsilon}.$$

Poissonille siis $\kappa(A) = \Theta\left(\frac{1}{h^2}\right)$ antaa askelille $n \approx \Theta\left(\frac{1}{h}\right)$.

((*) minimoidaan $\max_{z \in [\lambda_1, \lambda_M]} |p_k(z)|$ Tšebyševin polynomien avulla)

3.4. Pohjustus

Tehdään muuttujanvaihto malliprobleemassa (M):

$\zeta = E\eta$ s.e. $\eta = E^{-1}\zeta$, jolloin alkuperäinen tehtävä saa muodon:

$$\tilde{f}(\zeta) = f(\eta) = f(E^{-1}\zeta) = \frac{1}{2}(E^{-1}\zeta)\cdot A(E^{-1}\zeta) - b \cdot E^{-1}\zeta$$

$$= \frac{1}{2}\zeta \cdot E^{-T}AE^{-1}\zeta - E^{-T}b \cdot \zeta = \frac{1}{2}\zeta \cdot \tilde{A}\zeta - \tilde{b}\cdot\zeta,$$

missä $\tilde{A} = E^{-T}AE^{-1}$, $\tilde{b} = E^{-T}b$.

Uusi tehtävä: $\min_{\zeta \in \mathbb{R}^M} \left(\frac{1}{2}\zeta \cdot \tilde{A}\zeta - \tilde{b}\cdot\zeta\right)$

Gradienttimenetelmä: $\zeta^{k+1} = \zeta^k - \alpha(\tilde{A}\zeta^k - \tilde{b})$ eli

$$\eta^{k+1} = \eta^k - \alpha E^{-1}E^{-T}(A\eta^k - b)$$

Olkoon $C = E^TE$: $\quad \eta^{k+1} = \eta^k - \alpha C^{-1}(A\eta^k - b)$

Edellinen versio on pohjustettu gradienttimenetelmä ja C on pohjustin. Jokaisella askeleella on ratkaistava systeemi

$$Cd = A\eta^k - b .$$

Vaaditaan:

(i) $\kappa(E^{-T} A E^{-1}) \ll \kappa(A)$

(ii) $Cd = e$ on halpa ratkaista

Choleskyn hajotelma $C = L^T L$ kelpaa, mutta tällöin tehtävä redusoituu suoraksi ja tilantarve voi muodostua ongelmaksi. Eräs ratkaisu: Epätäydellinen Cholesky, tehdään paras mahdollinen approksimaatio rajoitetussa tilassa, esim. ilman täyttymistä.