3.5 Jacobi-Davidsonova metoda

Iščemo eno ali več (dominantnih) lastnih vrednosti $n \times n$ matrike A, kjer je n velik. Matrika A je lahko razpršena, ni pa nujno.

Zaradi velikega n reševanje sistema z matriko A ne pride v poštev.

Pri metodah, ki temeljijo na podprostorih Krilova (Arnoldi, Lanczos, ...) je podprostor, v katerem iščemo aproksimacije (Ritzeve, Petrove, harmonične Ritzeve vrednosti, ...) v bistvu odvisen le od začetnega vektorja v_1.

Pri Jacobi-Davidsonovi metodi podprostor širimo na drug način. Metodo sta razvila van der Vorst in Sleijpen leta 1996. Temelji pa na kombinaciji dveh idej:

- Jacobijeva metoda (1840)
- Davidsonova metoda (1975)

Glavna ideja

Naj bo $\mathcal{V}_k$ podprostor dimenzije k in naj bo θ_k dominantna Ritzeva vrednost za A in $\mathcal{V}_k$ z ustreznim normiranim Ritzevim vektorjem u_k.

Popravek za u_k iščemo v podprostoru $u_k^\perp$. Ortogonalna projekcija A na ta podprostor je $B = (I - u_k u_k^H)A(I - u_k u_k^H)$. Zapišemo (upoštevamo $\theta_k = u_k^H A u_k$)

$$A = B + A u_k u_k^H + u_k u_k^H A - \theta_k u_k u_k^H.$$

Nastavek je $A(u_k + v) = \lambda(u_k + v)$, od tod pa iz $B u_k = 0$ sledi

$$(B - \lambda I)v = -r + (\lambda - \theta_k - u_k^H A v)u_k.$$

Ker sta leva stran in r ortogonalna na u_k, mora biti faktor pred u_k enak 0 in dobimo

$$(B - \lambda I)v = (I - u_k u_k^H)(A - \lambda I)(I - u_k u_k^H)v = -r.$$

Namesto λ vzamemo približek θ_k.

Korekcijsko enačbo

$$(I - u_k u_k^H)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^H)v = -r$$

rešimo le približno in z novim vektorjem razširimo bazo $\mathcal{V}_k$.

Jacobi-Davidsonova metoda - 2

Naj bo $\mathcal{V}_k$ podprostor dimenzije k in naj bo θ_k dominantna Ritzeva vrednost za A in $\mathcal{V}_k$ z ustreznim normiranim Ritzevim vektorjem u_k.

Popravek za u_k iščemo v podprostoru $u_k^\perp$. Korekcijsko enačbo

$$(I - u_k u_k^H)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^H)v = -r$$

rešimo le približno in z novim vektorjem razširimo bazo $\mathcal{V}_k$.

- Če za v vzamemo r, dobimo Arnoldijevo metodo, saj je $\mathcal{L}(u_k, r) = \mathcal{L}(u_k, Au_k)$.
- Če v aproksimiramo z $(D_A - \theta_k I)^{-1} r$, dobimo Davidsonovo metodo.
- Če točno rešimo sistem $(A - \theta_k I)v = -r$, dobimo $v = u_k$, kar ni v redu.

Pri J-D metodi iščemo približek $\widetilde{v}$ za rešitev sistema

$$(I - u_k u_k^H)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^H)v = -r, \quad v \perp u_k.$$

Če vzamemo vedno točno rešitev v, potem se izkaže, da imamo kvadratično konvergenco (pri simetričnih matrikah celo kubično), vendar moramo v tem primeru reševati sistem z matriko A.

Za približno reševanje sistema $(I - u_k u_k^H)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^H)v = -r$, $t \perp u_k$, naredimo nekaj korakov kakšne iterativne metode, npr. GMRES.

Algoritem za Jacobi-Davidsonovo metodo

1. **Start:** Izberi začetni vektor $\|v_1\| = 1$.
   - Postavi $V_1 = [v_1]$, $u = v_1$, $\theta = u^H A u$ in izračunaj $r = Au - \theta u$.

2. **Zunanja zanka:** Za $k = 1, \ldots, m-1$:
   - Približno reši $(I - uu^H)(A - \theta I)(I - uu^H)v = -r, \quad v \perp u.$
   - Ortogonaliziraj v glede na V_k (RGS) in razširi V_k v V_{k+1}.
   - Poišči dominantni lastni par (θ, s) matrike $V_{k+1}^H A V_{k+1}$, kjer je $\|s\| = 1$.
   - Izračunaj Ritzev vektor $u = V_{k+1} s$ in ostanek $r = Au - \theta u$.
   - Testiraj konvergenco in po potrebi končaj.

3. **Ponovni zagon:** Postavi $V_1 = [u]$ in ponovi točko 2.

Obnašanje Jacobi-Davidsonove metode

V primeru simetrične matrike Ritzeve vrednosti monotono konvergirajo proti dominantni lastni vrednosti. V bližini rešitve imamo kubično konvergenco (če bi korekcijsko enačbo reševali točno). Ker namesto točnega reševanja uporabljamo GMRES (lahko pa tudi simetrično varianto MINRES), moramo poiskati kompromis med številom J-D iteracij in številom računanj produkta Ax.

V primeru nesimetrične matrike ali pri računanju notranjih lastnih vrednosti simetrične matrike imamo težave, ki pa se dajo odpraviti z uporabo harmoničnih Ritzevih vrednosti. Z njimi lahko poiščemo lastne vrednosti, ki so po absolutni vrednosti najmanjše in tako s premiki dobimo iskane lastne vrednosti.

J-D kot nepopolna Newtonova metoda

Za skoraj vse vektorje a, v je lastni vektor x matrike A, skaliran tako, da je $a^H x = 1$, rešitev enačbe $F(x) = 0$, kjer je

$$F(x) = Ax - \theta x = 0, \quad \theta = \theta(x) = \frac{v^H A x}{v^H x}.$$

Če je u_k približek za x, potem po Newtonovi metodi naslednji približek dobimo kot $u_{k+1} = u_k + t$, kjer je $t \perp a$,

$$JF(u_k)t = -r, \quad r = Au_k - \theta u_k$$

in $JF(x) = \left(I - \dfrac{xv^H}{v^H x}\right)(A - \theta I)$. Dobimo korekcijsko enačbo

$$\left(I - \frac{u_k v^H}{v^H u_k}\right)(A - \theta I)t = -r, \quad t \perp a.$$

J-D kot nepopolna Newtonova metoda - 2

Za poljuben tak y, da je $a^H y \neq 0$, je sistem

$$\left(I - \frac{u_k v^H}{v^H u_k}\right)(A - \theta I)t = -r, \quad t \perp a,$$

ekivalenten sistemu

$$\left(I - \frac{u_k v^H}{v^H u_k}\right)(A - \theta I)\left(I - \frac{y a^H}{a^H y}\right) t = -r, \quad t \perp a.$$

Pri fiksnih a, v, y imamo pri Newtonovi metodi kvadratično konvergenco, če pa a, v, y konvergirajo k nekim vektorjem, imamo asimptotično kvadratično konvergenco. Če vzamemo $a = v = y = u_k$, dobimo korekcijsko enačbo J-D metode.

To pomeni, da lahko J-D obravnavamo kot nepopolno Newtonovo metodo. Če bi v vsakem koraku J-D metode točno rešili sistem, bi imeli asimptotično Newtonovo metodo, mi pa v vsakem koraku vzamemo le približek namesto točne rešitve.

Predpogojevanje

Pri reševanje korekcijske enačbe je dobro uporabiti predpogojevanje.

$$(I - u_k u_k^H)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^H)v = -r$$

Denimo, da imamo na voljo matriko K, da je $K^{-1}(A - \theta_k I) \approx I$. Pri uporabi moramo tudi K zožiti na isti podprostor, torej uporabimo

$$\widetilde{K} = (I - u_k u_k^H)K(I - u_k u_k^H).$$

Če za reševanje korekcijske enačbe uporabljamo metode podprostorov Krilova, moramo v vsakem koraku izračunati produkt

$$z = \widetilde{K}^{-1}\widetilde{A}w,$$

kjer je $\widetilde{A} = (I - u_k u_k^H)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^H)$.

1. $\widetilde{A}w = (I - u_k u_k^H)g$, kjer je $g = (A - \theta_k I)w$, saj je $u_k^H w = 0$.
2. reši $\widetilde{K}z = (1 - u_k u_k^H)g$, ker je $g \perp u_k$, je $Kz = g - \beta u_k$, $z = K^{-1}g - \beta K^{-1}u_k$, kjer je
$$\beta = \frac{u_k^H K^{-1} g}{u_k^H K^{-1} u_k}.$$

Deflacija

Ko najdemo lastni par (λ, x), nadaljujemo samo z podprostorom, ki ga razpenjajo preostali vektorji.

V primeru ortogonalne deflacije nadaljujemo z

$$(I - xx^H)A(I - xx^H).$$

V primeru več vektorjev nadaljujemo z

$$(I - ZZ^H)A(I - ZZ^H),$$

kjer je $AZ = ZS$ delni Schurov razcep. Stolpci matrike Z so ortonormirani, matrika S pa je zgornja trikotna z lastnimi vrednostmi na diagonali.

Ponovni zagon (restart)

Ko je dimenzija iskalnega podprostora prevelika, izločimo manjši podprostor in nadaljujemo z njim.

V zadnjem koraku poiščemo Schurovo formo matrike $V_k^H A V_k$ in jo preuredimo tako, da so Ritzeve vrednosti, ki so blizu iskani tarči, v zgornjem delu. Potem nov začetni podprostor dobimo iz začetnih Schurovih vektorjev.

Harmonične Ritzeve vrednosti

Če je $\mathcal{V}_k$ podprostor dimenzije k, potem je θ Ritzeva vrednost matrike A, če za nek $u \in \mathcal{V}_k$, $u \neq 0$, velja

$$Au - \theta u \perp \mathcal{V}_k.$$

θ je harmonična Ritzeva vrednost matrike A glede na $\mathcal{W}_k$, če je θ^{-1} Ritzeva vrednost matrike A^{-1} glede na $\mathcal{W}_k$.

Naj bo $\mathcal{V}_k$ podprostor dimenzije k. Potem je θ harmonična Ritzeva vrednost A glede na $A\mathcal{V}_k$ natanko tedaj, ko za nek $u \in \mathcal{V}_k$, $u \neq 0$, velja

$$Au - \theta u \perp A\mathcal{V}_k.$$

Naj $V_k = [v_1 \ \cdots \ v_k]$ baza za $\mathcal{V}_k$ in $W_k = [w_1 \ \cdots \ w_k]$ baza za $\mathcal{W}_k := A\mathcal{V}_k$. Potem je θ harmonična Ritzeva vrednost A glede na $A\mathcal{V}_k$ natanko tedaj, ko je

$$(W_k^H V_k)^{-1} W_k^H A V_k s = \theta s \quad \text{za nek } s \in \mathbb{C}^k, \ s \neq 0.$$

Če sta V_k in W_k taki ortogonalni bazi, da je $W_k = AV_k$, potem je $W_k^H A V_k = I$ in izračunati moramo lastne vrednosti matrike $(W_k^H V_k)^{-1}$. To lahko naredimo brez inverza, saj lastne vrednosti in vektorje dobimo iz lastnih parov $W_k^H V_k$.

Korekcijska enačba za harmonične Ritzeve vrednosti

Z uporabo harmoničnih Ritzevih vrednosti lahko izračunamo lastne vrednosti z minimalno absolutno vrednostjo.

Naj bo (θ_k, u_k) harmonični Ritzev par v k-tem koraku J-D algoritma. Ostanek $r = Au_k - \theta u_k$ je ortogonalen na $z_k := Au_k$.

Pri korekcijski enačbi sedaj iščemo popravek, ki bo ortogonalen na z_k (pri standardni metodi u_k). Namesto ortogonalne projekcije na $z_k^\perp$ uporabimo poševno projekcijo

$$I - \frac{u_k z_k^H}{z_k^H u_k},$$

saj tako u_k pošljemo v 0.

Nova korekcijska enačba je

$$\left(I - \frac{u_k z_k^H}{z_k^H u_k} \right) (A - \theta I) \left(I - \frac{u_k z_k^H}{z_k^H u_k} \right) t = -r.$$

J-D algoritem s harmoničnimi Ritzevimi vrednostmi

2. Zunanja zanka: Za $k = 1, \ldots, m-1$:

- Približno reši

$$\left(I - \frac{uz^H}{z^H u}\right)(A - \theta I)\left(I - \frac{uz^H}{z^H u}\right) t = -r, \quad t \perp z.$$

- Ortogonaliziraj t glede na V_k (RGS) in razširi V_k v V_{k+1}.
- Ortogonaliziraj At glede na W_k (RGS) in razširi W_k v W_{k+1}.
- Poiščci minimalni lastni par (θ, s) matrike $(W_k^H V_k)^{-1} W_k^H A V_k$, kjer je $\|s\| = 1$.
- Izračunaj Ritzev vektor $u = V_{k+1} s$, ostanek $r = Au - \theta u$ in vektor $z = Au$.
- Testiraj konvergenco in po potrebi končaj.