

Ritzeve vrednosti

Denimo, da stolpci matrike V_k tvorijo ortonormirano bazo za podprostor Krilova $\mathcal{K}_k(A, r_0)$.

Približke za lastne vrednosti in vektorje iz podprostora \mathcal{K}_k dobimo iz *Galerkinovega pogoja*

$$Av - \mu v \perp \mathcal{K}_k, \quad v \in \mathcal{K}_k.$$

Ker stolpci v_k tvorijo ortonormirano bazo za \mathcal{K}_k , to pomeni:

- μ je lastna vrednost $k \times k$ matrike $H_k = V_k^T A V_k$,
- $v = V_k w$, kjer je w , $\|w\|_2 = 1$, lastni vektor H_k , ki pripada μ .

μ je *Ritzeva vrednost*, v pa *Ritzev vektor*.

Velja $\mathcal{K}_k(\alpha A + \beta I, r_0) = \mathcal{K}_k(A, r_0)$ za poljuben β in $\alpha \neq 0$.

Ker je podprostor Krilova invarianten na skaliranje in pomike, je položaj lastnih vrednosti glede na koordinatno izhodišče nepomemben. Namesto tega je pomembno, katere lastne vrednosti so zunanje in katere notranje.

Če vzamemo najmanjši krog, ki vsebuje vse lastne vrednosti, potem bodo Ritzeve vrednosti najprej skonvergirale k lastnim vrednostim, ki so blizu roba kroga.

Ritzeve vrednosti za simetrično matriko

Če je $A = A^T$ so vse Ritzeve vrednosti realne.

Ritzeve vrednosti pri k se prepletajo z Ritzevimi vrednosti pri $k + 1$, saj se lastne vrednosti T_k prepletajo z lastnimi vrednostmi T_{k+1} . Zaradi tega Ritzeve vrednosti monotono konvergirajo proti lastnim vrednostim matrike A .

Ritzeve vrednosti najprej skonvergirajo k zunanjim, torej največjim in najmanjšim, lastnim vrednostim.

Metoda CG in matrika T_k

Metoda CG je povezana z Lanczosevo metodo. Če stolpci matrike V_k tvorijo ortonomirano bazo za podprostor Krilova $\mathcal{K}_k(A, r_0)$, potem je $T_k = V_k^T A V_k$ tridiagonalna matrika.

$$T_k = \begin{bmatrix} \gamma_1 & \delta_1 & & \\ \delta_1 & \gamma_2 & \cdots & \\ & \cdots & \cdots & \delta_{k-1} \\ & & \delta_{k-1} & \gamma_k \end{bmatrix}.$$

Iz

$$p_j = r_{j-1} + \beta_{j-1} p_{j-1}$$

$$r_j = r_{j-1} - \alpha_j A p_j,$$

kjer je

$$\alpha_j = \frac{r_{j-1}^T r_{j-1}}{p_j^T A p_j}, \quad \beta_{j-1} = \frac{r_{j-1}^T r_{j-1}}{r_{j-2}^T r_{j-2}},$$

dobimo

$$\gamma_1 = \frac{1}{\alpha_1}, \quad \gamma_j = \frac{1}{\alpha_j} + \frac{\beta_{j-1}}{\alpha_{j-1}},$$
$$\delta_j = \frac{\sqrt{\beta_j}}{\alpha_j}.$$

Hitrost konvergence CG in Ritzeve vrednosti

Hitrost konvergence je odvisna od tega, kako dobro Ritzeve vrednosti aproksimirajo lastne vrednosti.

Če so $\theta_1, \dots, \theta_k$ Ritzeve vrednosti za $V_k^T A V_k$, potem je polinom P_k stopnje k , za katerega velja $P_k(0) = 1$, enak

$$P_k(t) = \frac{(\theta_1 - t)(\theta_2 - t) \cdots (\theta_k - t)}{\theta_1 \theta_2 \cdots \theta_k}.$$

Velja: Če θ_1 dobro aproksimira λ_1 , potem od tu naprej metoda CG konvergira tako kot da lastne vrednosti λ_1 ne bi bilo. Namesto od $\kappa = \lambda_1/\lambda_n$ je sedaj konvergenca odvisna od λ_2/λ_n .

Predpogojevanje

$$r_0 = b - Ax_0, \quad p_1 = r_0$$

$$j = 1, 2, \dots, k$$

$$\alpha_j = \frac{\|r_{j-1}\|^2}{p_j^T A p_j}$$

$$x_j = x_{j-1} + \alpha_j p_j$$

$$r_j = r_{j-1} - \alpha_j A p_j$$

$$\beta_j = \frac{\|r_j\|^2}{\|r_{j-1}\|^2}$$

$$p_{j+1} = r_j + \beta_j p_j$$

Naj bo s.p.d. matrika K aproksimacija za A . Metode CG ne moremo uporabiti na $K^{-1}Ax = K^{-1}b$, saj matrika $K^{-1}A$ ni simetrična.

V primeru, ko je znan razcep Choleskega $K = LL^T$, lahko CG uporabimo na simetričnem sistemu

$$L^{-1}AL^{-T}y = L^{-1}b, \quad x = L^{-T}y.$$

Druga možnost je, da uporabimo skalarni produkt $[x, y] = \langle x, Ky \rangle$. V tem skalarnem produktu je $K^{-1}A$ pozitivno definitna, saj je

$$[K^{-1}Ax, x] = \langle K^{-1}Ax, Kx \rangle = \langle Ax, x \rangle > 0.$$

Predpogojevanje

Običajni CG

$$r_0 = b - Ax_0, \quad p_1 = r_0$$

$$j = 1, 2, \dots, k$$

$$\alpha_j = \frac{\|r_{j-1}\|^2}{p_j^T A p_j}$$

$$x_j = x_{j-1} + \alpha_j p_j$$

$$r_j = r_{j-1} - \alpha_j A p_j$$

$$\beta_j = \frac{\|r_j\|^2}{\|r_{j-1}\|^2}$$

$$p_{j+1} = r_j + \beta_j p_j$$

Predpogojeni CG

$$r_0 = b - Ax_0, \quad p_1 = K^{-1} r_0$$

$$j = 1, 2, \dots, k$$

$$\alpha_j = \frac{r_{j-1}^T K^{-1} r_{j-1}}{p_j^T A p_j}$$

$$x_j = x_{j-1} + \alpha_j p_j$$

$$r_j = r_{j-1} - \alpha_j A p_j$$

$$\beta_j = \frac{r_j^T K^{-1} r_j}{r_{j-1}^T K^{-1} r_{j-1}}$$

$$p_{j+1} = K^{-1} r_j + \beta_j p_j$$

To je ekvivalentno temu, da bi uporabili običajni CG za sistem $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ za

$$K^{-1/2} A K^{-1/2} y = K^{-1/2} b, \quad x = K^{-1/2} y.$$

Veljajo zveze

$$\tilde{x}_k = K^{1/2} x_k, \quad \tilde{r}_k = K^{-1/2} r_k, \quad \tilde{p}_k = K^{1/2} p_k, \quad \tilde{\alpha}_k = \alpha_k, \quad \tilde{\beta}_k = \beta_k.$$

CGLS

Če rešujemo $Ax = b$ in je A nesimetrična, lahko uporabimo CG na normalnem sistemu

$$A^T Ax = A^T b.$$

Prednost: izognemo se dolgim rekurzijam, ki jih potrebujeta FOM in GMRES.

Slabost: občutljivost matrike $A^T A$ je kvadrat občutljivosti matrike A .

To deluje v redu, če so singularne vrednosti matrike A lepo razporejene po gručah oziroma kadar je matrika A blizu ortogonalne matrike.

Ustrezna metoda brez eksplicitnega računanja $A^T A$ je CGLS (Paige in Saunders 1982).

Izrek 1. *Metoda CGLS vrne x_j , ki minimizira $\|b - Ax_j\|_2$ po afinem podprostoru $x_0 + \mathcal{K}_j(A^T A, A^T r_0)$.*

LSQR

Normalni sistem lahko uporabimo tudi za reševanje predoločenega sistema $Ax = b$ po m.n.k.. Še boljšo metodo pa dobimo, če upoštevamo ekvivalenten *razširjeni sistem*

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Če začnemo s približkom $\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, je prvi vektor v ON bazi za podp. Krilova $w_1 = \frac{1}{\|b\|} \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$.

Naslednji vektor je $w_2 = \frac{1}{\|A^T b\|} \begin{bmatrix} 0 \\ A^T b \end{bmatrix}$.

Po vrsti se izmenjujejo vektorji oblike $\begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix}$ in $\begin{bmatrix} 0 \\ v \end{bmatrix}$.

Če sestavimo matriki U_k in V_k iz prvih k stolpcev u in v , velja

$$\beta_1 u_1 = b$$

$$\alpha_1 v_1 = A^T u_1$$

$$i = 1, 2, \dots$$

$$\beta_{i+1} u_{i+1} = Av_i - \alpha_i u_i$$

$$\alpha_{i+1} v_{i+1} = A^T u_{i+1} - \beta_{i+1} v_i$$

Skalarji α_i, β_i so izbrani tako, da so vektorji u_i in v_i normirani.

Delna bidiagonalizacija

$$\beta_1 u_1 = b, \quad \alpha_1 v_1 = A^T u_1$$

$$i = 1, 2, \dots$$

$$\beta_{i+1} u_{i+1} = Av_i - \alpha_i u_i, \quad \alpha_{i+1} v_{i+1} = A^T u_{i+1} - \beta_{i+1} v_i$$

Če sestavimo matriki U_k in V_k iz prvih k stolpcev u in v , velja

$$\beta_1 U_{k+1} e_1 = b$$

$$AV_k = U_{k+1} B_k$$

$$A^T U_{k+1} = V_k B_k^T + \alpha_{k+1} v_{k+1} e_{k+1}^T$$

za

$$B_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & & & \\ & \beta_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \alpha_k & \\ & & & \beta_{k+1} & \end{bmatrix}.$$

Povezava z Lanczosevo metodo za $A^T Ax = A^T b$:

Izrek 2. Velja $T_k = B_k^T B_k$, kjer je T_k tridiagonalna matrika iz Lanczoseve metode za matriko $A^T A$ in začetni vektor $A^T b$. Velja še

$$A^T AV_k = V_k T_k + \alpha_{k+1} \beta_{k+1} v_{k+1} e_{k+1}^T.$$

Rešitev LSQR

Iščemo $\begin{bmatrix} r_k \\ x_k \end{bmatrix}$, da bo ostanek

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_k \\ x_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

pravokoten na podprostor Krilova.

Iz $A^T A V_k = V_k T_k + \alpha_{k+1} \beta_{k+1} v_{k+1} e_{k+1}^T$ sledi, da iščemo približek oblike $x_k = V_k y_k$.

Ostanek r_k je potem oblike $r_k = U_{k+1} t_{k+1}$.

Vzeti moramo podprostor Krilova, ki ga razpenjajo stolpci matrike $\begin{bmatrix} U_{k+1} & 0 \\ 0 & V_k \end{bmatrix}$.

Iz $\begin{bmatrix} U_{k+1}^T & 0 \\ 0 & V_k^T \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{k+1} t_{k+1} \\ V_k y_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \right) = 0$ dobimo

$$\begin{bmatrix} I & B_k \\ B_k^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_{k+1} \\ y_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta_1 e_1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

kar je ravno predoločen sistem $\min \|B_k y_k - \beta_1 e_1\|$.