6.1 Metode podprostorov za problem lastnih vrednosti

Dana je velika razpršena matrika $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ za katero bi radi izračunali nekaj lastnih vrednosti (in vektorjev).

Ne moremo si privoščiti, da bi izračunali vse lastne vrednosti preko npr. QR razcepa, saj bi na ta način porabili preveč časa in prostora.

V poštev pridejo iterativne metode podprostorov. Najpreprostejša metoda tega tipa je *potenčna metoda*, s katero lahko izračunamo dominantni lastni par.

Potenčna metoda temelji na tem, da za naključno izbran začetni vektor v_1 vektorji $v_j = A^{j-1}v_1/\|A^{j-1}v_1\|$ po smeri konvergirajo proti dominantnemu lastnemu vektorju.

Vektorji $v_1, \ldots, v_k$, ki jih dobimo pri potenčni metodi, razpenjajo podprostor Krilova

$$\mathcal{K}_k(A, v_1) = \mathrm{Lin}(v_1, Av_1, \ldots, A^{k-1}v_1) = \{p(A)v_1 : \; p \in \mathcal{P}_{k-1}\},$$

kjer je $\mathcal{P}_{k-1}$ prostor vseh polinomov stopnje manjše ali enake k.

Izkaže se, da v podprostoru $\mathcal{K}_k$, ki vsebuje še prejšnje vektorje iz potenčne metode, lahko dobimo še boljšo aproksimacijo za dominanten lastni vektor.

Čeprav najpogosteje uporabljamo podprostore Krilova, lahko približke za lastne vrednosti dobimo iz poljubnega podprostora.

Ritzeve vrednosti

Imamo matriko $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ in podprostor $\mathcal{V}_k$ dimenzije k.

Približke za lastne vrednosti in vektorje dobimo iz *Ritz-Galerkinovega pogoja*

$$Az - \mu z \perp \mathcal{V}_k, \quad v \in \mathcal{V}_k.$$

Če stolpci V_k tvorijo ortonormirano bazo za $\mathcal{V}_k$, se Ritz-Galerkinov pogoj spremeni v

$$V_k^H A V_k s = \mu s,$$

kjer je $s \in \mathbb{C}^k$.

Če je μ lastna vrednost matrike $H_k = V_k^H A V_k$, je μ *Ritzeva vrednost*, pripadajoči vektor $z = V_k s$ pa *Ritzev vektor*. Skupaj tvorita *Ritzev par* (μ, z).

Arnoldijev algoritem

Za nesimetrične matrike lahko uporabimo podprostor Krilova, ki ga zgeneriramo z Arnoldijevim postopkom. Algoritem se konča pri izbranem k ali pa, ko je $h_{j+1,j} = 0$.

$j = 1, \ldots, k$
  $z = Av_j$
  $i = 1, \ldots, j$
    $h_{ij} = v_i^T z$
    $z = z - h_{ij} v_i$
  $h_{j+1,j} = \|z\|$
  če je $h_{j+1,j} = 0$, potem prekini računanje
  $v_{j+1} = z / h_{j+1,j}$

Če se Arnoldijev postopek izvaja do $j = k$, dobimo

$$AV_k = V_k H_k + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T = V_{k+1} H_{k+1,k},$$

kjer je H_k $k \times k$ zgornja Hessenbergova, stolpci V_k pa so ON baza za $\mathcal{K}_k(A, v_1)$.

Pri Arnoldiju je (μ, z) Ritzev par, če je $z = V_k s$, kjer je μ lastna vrednost H_k, s pa njen pripadajoči lastni vektor.

Konvergenca Ritzevih lastnih vrednosti pri Arnoldijevi metodi

Imamo
$$AV_k = V_k H_k + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T = V_{k+1} H_{k+1,k},$$

kjer je H_k $k \times k$ zgornja Hessenbergova, stolpci V_k pa so ON baza za $\mathcal{K}_k(A, v_1)$.

Naj bo (μ, z) Ritzev par, torej $z = V_k s$, kjer je μ lastna vrednost H_k, s pa njen pripadajoči lastni vektor.

Za ostanek potem dobimo

$$r = Az - \mu z = h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T s,$$

torej
$$\|r\|_2 = |h_{k+1,k}| \cdot |e_k^T s|.$$

Če naj bo (μ, z) dober približek za lastni par matrike A, mora biti ostanek majhen in to lahko testiramo brez računanja z.

V primeru nesimetrične matrike majhen ostanek še ni nujno dovolj, saj za matrike, ki se dajo diagonalizirati kot $A = X \Lambda X^{-1}$ velja Bauer-Fikeov izrek

$$\min_i |\lambda_i - \mu| \leq \|r\| \|X\| \|X^{-1}\|.$$

Konvergenca Ritzevih vrednosti k zunanjim lastnim vrednostim

Za podprostor Krilova velja

$$\mathcal{K}_k(\alpha A + \beta I, u_1) = \mathcal{K}_k(A, u_1)$$

za poljuben β in $\alpha \neq 0$. Torej dobimo isti podprostor Krilova ne glede na to, če matriko pomnožimo s skalarjem oziroma uporabimo pomik.

To se mora odražati tudi na Ritzevih vrednostih. Ker so metode podprostorov Krilova invariantne 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 lahko pričakujemo, da bo za naključno izbrane začetne vektorje metoda Krilova najprej skonvergirala k tistim lastnim vrednostim, ki so blizu roba tega kroga. `arngo, arngoB`

Obstajajo tudi pristopi, kako lahko metode podprostorov Krilova pripravimo do tega, da konvergirajo k notranjim lastnim vrednostim.

Shift-and-invert Arnoldi

Konvergenco k notranjim lastnim vrednostim lahko izboljšamo, če namesto za A vzamemo podprostor Krilova, ki ga generira matrika $(A - \tau I)^{-1}$, kjer je $\tau \in \mathbb{C}$ dani cilj.

Pri tej metodi je potrebno produkt z matriko $(A - \tau I)^{-1}$ izračunati točno (in ne le približno rešiti sistem s kakšno iterativno metodo).`arngo2`

Racionalni Arnoldi:

- zanimajo nas lastne vrednosti blizu $\tau_1, \ldots, \tau_m$,
- najprej zgeneriramo podprostor Krilova za matriko $(A - \tau_1)^{-1}$ in izračunamo lastne vrednosti v okolici τ_1.
- gremo na τ_2, a ne završemo podprostora. Obstaja transformacija, s katero lahko podprostor spremenimo v podprostor generiran z $(A - \tau_2)^{-1}$.

Polinomsko predpogojevanje: Skonstruiramo fiksen polinom nizke stopnje p, ki naj bi imel pri neželjenih lastnih vrednostih majhno absolutno vrednosti in namesto z matriko A delamo z matriko $p(A)$.

Petrov–Galerkinov pogoj in vrednosti Petrova

Denimo, da za matriko A iščemo približke za lastne vektorje v prostoru $\mathcal{V}_k$, zahtevamo pa, da bo ostanek pravokoten na prostor $\mathcal{W}_k$.

Približke za lastne vrednosti in vektorje dobimo iz *Petrov–Galerkinovega pogoja*

$$Az - \mu z \perp \mathcal{W}_k, \quad z \in \mathcal{V}_k.$$

Če sta V_k in W_k matriki z ON stolpci, ki razpenjajo *iskalni podprostor* $\mathcal{V}_k$ in *testni podprostor* $\mathcal{W}_k$, dobimo, da je μ lastna vrednost $k \times k$ posplošenega problema lastnih vrednosti

$$W_k^H A V_k s = \mu W_k^H V_k s.$$

μ je vrednost Petrova, $z = V_k s$ pa vektor Petrova.

Dostikrat, ni pa nujno, podprostora izberemo tako, da sta V_k in W_k biortogonalni bazi, kar pomeni $W_k^H V_k = I$. Potem so vrednosti Petrova kar lastne vrednosti matrike $W_k^H A V_k$.

Harmonične Ritzeve vrednosti

Pri harmoničnih Ritzevih vrednostih za testni podprostor $\mathcal{W}_k$ izberemo $A\mathcal{V}_k$.

Iz pogoja

$$Au - \theta u \perp A\mathcal{V}_k, \quad v \in \mathcal{V}_k$$

dobimo posplošeni problem lastnih vrednosti

$$V_k^H A^H A V_k s - \theta V_k^H A^H V_k s.$$

Naj stolpci V_k sestavljajo bazo za V_k, ki jo izberemo tako, da stolpci $W_k = AV_k$ sestavljajo ON bazo za $A\mathcal{V}_k$. Potem se posplošeni problem spremeni v

$$V_k^H A^H V_k s = \frac{1}{\theta} s = W_k^H A^{-1} W_k s.$$

To pa pomeni, da je θ^{-1} Ritzeva vrednost za A^{-1} glede na prostor $A\mathcal{V}_k$. Imenujemo jo *harmonična Ritzeva vrednost* in pričakujemo, da bo θ dober približek za notranje lastne vrednosti. Izračun A^{-1} ni nikoli potreben, saj je $W_k^H V_k s = \theta^{-1} s$.

Če iščemo lastne vrednosti v bližini cilja τ, dobimo

$$V_k^H (A - \tau I)^H (A - \tau I) V_k s = (\theta - \tau)^{-1} V_k^H (A - \tau I) V_k^H s.$$

arngo2H

7.1 Lanczosev algoritem za lastne vrednosti

Če je A simetrična, se simetričnost pri Arnoldijevem algoritmu prenese na zgornjo Hessenbergovo matriko H, ki postane simetrična in tridiagonalna.

$v_1 = r_0/\|r_0\|$, $\beta_0 = 0$, $v_0 = 0$
$j = 1, 2, \ldots, k$
    $z = Av_j - \beta_{j-1}v_{j-1}$
    $\alpha_j = v_j^T z$
    $z = z - \alpha_j v_j$
    $\beta_j = \|z\|$
    če je $\beta_j = 0$, prekini računanje
    $v_{j+1} = z/\beta_j$

Dobimo $AV_k = V_k T_k + \beta_k v_{k+1} e_k^T$, kjer je

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} \\ & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix}.$$

Lastne vrednosti matrike T_k so Ritzeve vrednosti.

Lastnosti Lanczosevega algoritma

- časovna zahtevnost in prostorske zahteve so manjše kot pri Arnoldiju,
- več se da povedati o konvergenci,
- do izgube ortogonalnosti pride hitreje kot pri Arnoldiju,
- ne moremo ugotoviti večkratnosti lastne vrednosti,
- lahko imamo težave z navidezno konvergenco,
- pojavijo se prividi lastnih vrednosti.

Ocene Lanczosevega algoritma

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}. Če so $\theta_k^{(k)} < \cdots < \theta_1^{(k)}$ Ritzeve vrednosti, ki jih dobimo v k-tem koraku Lanczosevega algoritma, potem velja

$$\theta_{k+1}^{(k+1)} < \theta_k^{(k)} < \theta_k^{(k+1)} < \cdots < \theta_2^{(k+1)} < \theta_1^{(k)} < \theta_1^{(k+1)}.$$

Zaradi tega Ritzeve vrednosti monotono konvergirajo proti lastnim vrednostim matrike A, pri čemer najprej skonvergirajo zunanje lastne vrednosti. lango

Izrek 1. *Za Ritzeve vrednosti, ki jih dobimo v k-tem koraku Lanczosevega algoritma, velja:*

1. *Obstaja k lastnih vrednosti matrike A, da je $|\theta_i^{(k)} - \lambda_i| \le \beta_k$ za $i = 1, \ldots, k$.*
2. *Če je $z = V_k s$ Ritzev vektor za Ritzevo vrednost θ, potem velja*

$$\min_i |\lambda_i - \theta| \le \|Az - \theta z\|_2 = \beta_k |e_k^T s|.$$

3. $\theta_i^{(k)} = \max_{\dim(S)=i} \min_{0 \neq x \in S \subset \mathcal{K}_k(A, v_1)} \rho(A, x)$.

Povezava z ortogonalnimi polinomi

Vektorjem $v_1, \ldots, v_k$, ki jih dobimo z Lanczosevo metodo kot ON bazo $\mathcal{K}_k(A, v_1)$, pripadajo t.i. *Lanczosevi polinomi* $P_0, \ldots, P_{k-1}$, da je $v_i = P_{i-1}(A)v_1$.

Lanczosevi polinomi zadoščajo tričlenski rekurzivni formuli

$$\beta_i P_i(A) = (A - \alpha_i I)P_{i-1}(A) - \beta_{i-1}P_{i-2}(A).$$

Če definiramo skalarni produkt polinomov kot

$$[P, Q] = \langle P(A)v_1, Q(A)v_1 \rangle,$$

potem je $[P_i, P_j] = 0$ za $i \neq j$.

Lema 1. *Ničle polinoma P_k so lastne vrednosti matrike T_k oziroma Ritzeve vrednosti.*