

8.1 Arnoldijev algoritem za lastne vrednosti

Za nesimetrične matrice podprostor Krilova zgeneriramo z Arnoldijevim postopkom.

Algoritem se konča pri izbranem k ali pa, ko je $h_{j+1,j} = 0$.

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

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

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

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

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

Zgled 1

Vzamemo matriko

$$A = [e_2 \ e_3 \ \cdots \ e_n \ e_1],$$

ki ima ortonormirane stolpce, lastne vrednosti pa so enakomerno razporejene po enotski krožnici v \mathbb{C} .

Če vzamemo $v_1 = e_1$, potem dobimo $v_2 = Av_1 = e_2$, $v_3 = Av_2 = e_3, \dots$

Za $k < n$ je $H_k = A(1 : k, 1 : k)$, kar pomeni, da so vse Ritzve vrednosti enake 0. Šele v koraku $k = n$ dobimo neničelne Ritzve vrednosti.

Tu nimamo težav z občutljivostjo, saj je občutljivost matrike lastnih vektorjev enaka 1.

Vemo, da 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 pomeni, da lahko podobne težave pričakujemo v primeru, ko so lastne vrednosti enakomerno razporejene na poljubni krožnici v kompleksni ravnini. [ZgledArn1](#)

Zgled 2

Vzamemo matriko

$$A = \text{diag} \left(\text{diag}(1, 2, \dots, 98), \begin{bmatrix} 100 & 1 \\ -1 & 100 \end{bmatrix} \right),$$

ki ima lastne vrednosti $1, 2, \dots, 98, 100 + i, 100 - i$. [ZgledArn2](#)

Šele po nekaj korakih dobimo kompleksne lastne vrednosti. Tik pred tem, ko se pojavijo kompleksne lastne vrednosti, se za največjo Ritzovo vrednost zdi, da je že skonvergirala.

Zgleda 3 in 4

Vzamemo petdiagonalno matriko s konstantnimi vrednostmi na diagonalah

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -2 & & & \\ 1 & 2 & 1 & -2 & & \\ 2 & 1 & 2 & 1 & -2 & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}.$$

ZgledArn3 Konvergence skoraj ni, razen k ekstremnim štirim lastnim vrednostim.

Spet vzamemo petdiagonalno matriko s konstantnimi vrednostmi na diagonalah, tokrat

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -0.4 & & & \\ 0 & 2 & 1 & -0.4 & & \\ 2 & 0 & 2 & 1 & -0.4 & \\ & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}.$$

ZgledArn4 Ritzeve vrednosti bolje aproksimirajo numerični zaklad matrike kot pa njen spekter.

$$F(A) = \left\{ \frac{x^H A x}{x^H x} : x \in \mathbb{C}^n, x \neq 0 \right\}.$$

Konvergenca

Pri Arnoldijevi metodi je konvergenca odvisna od izbire začetnega vektorja.

Zanima nas konvergenca proti lastnemu paru (λ, x) .

Naj bo $X = [x \ X_2]$ obrnljiva matrika. Potem je

$$X^{-1}AX = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}.$$

Če s transformacijo X preslikamo začetni vektor u_1 , dobimo $X^{-1}u_1 = \begin{bmatrix} u_\lambda \\ u_r \end{bmatrix}$.

Velja ocena:

$$\tan \theta(x, \mathcal{K}_k) \leq \kappa(X) \min_{\substack{p \in \mathbb{P}_{k-1} \\ p(\lambda)=1}} \frac{\|p(A_{22})u_r\|_2}{|u_\lambda|}.$$

To bo majhno, če bo polinom imel majhne absolutne vrednosti pri vseh ostalih lastnih vrednostih.

Hitrost konvergence

Iščemo polinom p stopnje $k - 1$, za katerega velja $p(\lambda_1) = 1$ in zavzame najmanjšo absolutno vrednost pri ostalih lastnih vrednostih. To je povezano s problemom najboljše enakomerne aproksimacije.

Če je Ω kompaktna množica, lahko definiramo $\|f\|_\infty = \max_{z \in \Omega} |f(z)|$. V našem primeru bomo za Ω vzeli spekter matrike A brez λ_1 .

Sedaj v bistvu iščemo polinom oblike $(z - \lambda_1)q(z)$, kjer je $q \in \mathbb{P}_{k-1}$, ki je najboljša enakomerna aproksimacija za $f(z) = 1$ na Ω oziroma minimizira

$$\|1 - (z - \lambda_1)q(z)\|_\infty$$

po vseh $q \in \mathbb{P}_{k-1}$.

To je spet povezano s polinomi Čebiševa.

EksPLICITNI ponovni zagon

Denimo, da naredimo najprej m korakov Arnoldijeve metode, potem pa metodo ponovno zaženemo z začetnim vektorjem u_+ , ki ga izberemo iz prostora $\text{Lin}(u_1, \dots, u_m)$.

Potem je $u_+ = p(A)u_1$ za nek polinom p stopnje kvečjemu $m - 1$.

Če u_1 razvijemo po bazi lastnih vektorjev kot

$$u_1 = a_1x_1 + \dots + a_nx_n,$$

potem velja

$$u_+ = a_1p(\lambda_1)x_1 + \dots + a_np(\lambda_n)x_n.$$

Pričakujemo lahko, da bo $\mathcal{K}_m(A, u_+)$ vseboval dobre aproksimacije za tiste lastne vrednosti, kjer je absolutna vrednost $p(\lambda)$ velika in slabe aproksimacije za lastne vrednosti, kjer je ta vrednost majhna.

Izbira u_+ v bistvu pomeni, da izberemo polinom, ki dobro separira lastne vrednosti na željene in neželjene.

Arnoldi s polinomskim filtriranjem

Začetni vektor u_1 iterativno menjamo s $q(A)u_1$, kjer je q polinom, ki ima veliko absolutno vrednost pri željenih lastnih vrednostih in majhno pri neželjenih lastnih vrednostih.

Podatke o območju željenih lastnih vrednosti prav tako pridobivamo iterativno z Arnoldijevo metodo.

1. izvedbi m korakov Arnoldijeve metode. Ritzeve vrednosti razdeli na željene μ_1, \dots, μ_k in neželjene μ_{k+1}, \dots, μ_m .
2. izberi tak polinom q stopnje $\leq m$, da je $|g(\mu_i)| \gg |g(\mu_j)|$ za $i = 1, \dots, k$ in $j = k + 1, \dots, m$.
3. vzemi $u_1 = q(A)u_1 / \|q(A)u_1\|$ in nadaljuj v točki 1.

To je posebej primerno zato, ker se z večanjem dimenzije podprostora Krilova zahtevnost Arnoldijeve metode zelo poveča. V vsakem koraku je namreč potrebno novi vektor ortogonalizirati na vse prejšnje. Zaradi tega je več ponovnih zagonov boljša rešitev.

Arnoldi z implicitnim zagonom (Sorensen (1992))

Če delamo ponovni zagon samo z enim vektorjem, lahko izgubimo preveč podatkov. Bolje je nadaljevati s primerno izbranim k -razsežnim podprostorom.

Pri IRA (Implicitly Restarted Arnoldi) naredimo $M = k + m$ korakov Arnoldija. Dobimo

$$AV_M = V_M H_M + h_{M+1,M} v_{M+1} e_M^T = V_{M+1} H_{M+1,M}.$$

Na H_M izvedemo m korakov QR algoritma s premiki $\theta_1, \dots, \theta_m$ in dobimo

$$H_M^{(m)} = Q^H H_M Q.$$

Sedaj za nov začetni podprostor \tilde{V}_k vzamemo prvih k stolpcev $V_M Q$, za \tilde{H}_k pa vodilno podmatriko $H_M^{(m)}$.

Izkaže se, da je

$$\tilde{v}_1 = \gamma (A - \theta_1 I) \cdots (A - \theta_m I) v_1,$$

stolpci \tilde{V}_k pa so ON baza za $\mathcal{K}_k(A, \tilde{v}_1)$.

Algoritem za IRA

izberi v_1, k, m

izvedi k korakov Arnoldija $\implies V_{k+1}, H_{k+1,k}$.

$$r = h_{k+1,k}v_{k+1}$$

dokler $\|r\| > \epsilon$ ponavljaj

izvedi m korakov Arnoldija $\implies V_{M+1}, H_{M+1,M}$.

izberi m premikov $\theta_1, \dots, \theta_m$ (npr. neželene Ritzve vrednosti)

naredi m korakov implicitnega QR za H_M s premiki $\theta_1, \dots, \theta_m \implies Q, \tilde{V}_{M+1}, H_M^{(m)}$

$$V_k = \tilde{V}_k$$

$$H_k = H_k^{(m)}$$

$$r = h_{k+1,k}^{(m)}\tilde{v}_{k+1} + h_{M+1,M}v_{M+1}e_M^T Q e_k$$

$$h_{k+1,k} = \|r\|$$

$$v_{k+1} = r/h_{k+1,k}$$

Harmonične Ritzve vrednosti in Arnoldi

Tudi pri Arnoldiju lahko uporabljamo harmonične Ritzve vrednosti.

Če uporabimo premik σ , je θ harmonična Ritzeva vrednost in u harmonični vektor, če je

$$Au - \theta u \perp (A - \sigma I)\mathcal{K}_k(A, v_1).$$

Lema 1. *Po k korakih Arnoldija dobimo $AV_k = V_k H_k + h_{k+1,k} v_{k+1} e_k^T = V_{k+1} H_{k+1,k}$. Če je ϑ lastna vrednost posplošenega problema lastnih vrednosti*

$$\vartheta(H_{k+1,k} - \sigma I_{k+1,k})^H (H_{k+1,k} - \sigma I_{k+1,k})y = (H_k - \sigma I_k)y,$$

potem je $\sigma + 1/\vartheta$ harmonična Ritzeva vrednost matrike A .

Izkaže se, da so harmonični Ritzevi vektorji kvalitetnejše aproksimacije za lastne vektorje, kot so harmonične Ritzve vrednosti za lastne vrednosti. Zato kot približek za lastno vrednost vzamemo Rayleighov kvocient harmoničnega vektorja.

Harmonični vektorji so posebej primerni za ponovni zagon. Če računamo notranje lastne vrednosti, bo tudi v primeru, ko je Ritzeva vrednost blizu tarče, Ritzev vektor lahko daleč od ustreznega lastnega vektorja. Pri harmoničnih vrednostih in vektorjih se to ne more zgoditi, saj ima harmonični vektor vedno močno komponento v smeri iskanega lastnega vektorja.

Shift-and-invert Arnoldi

Konvergenca 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).

Racionalni Arnoldi:

- zanimajo nas lastne vrednosti blizu τ_1, \dots, τ_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 zavržemo 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 $p(A)$.