Angepasste Krylov-Raum Verfahren für normale Matrizen

(Akkomodation/Assimilation)

Jens–Peter M. Zemke

Vortrag am

4. Februar 2004

im Rahmen der zweiwöchentlich stattfindenden Vorträge des

Arbeitsbereich Mathematik

Technische Universität Hamburg-Harburg

Ausblick.

Alte Bekannte.

Primäre Unterscheidung: *direkte* oder *iterative* Verfahren für

$$Ax = b, \qquad Av = v\lambda.$$

Griff zu *iterativen* Ansätzen, wenn A *groß*, *dünnbesetzt* und Struktur durch *direkte* Verfahren zu sehr zerstört wird.

Die meisten verwendeteten Verfahren sind Instanzen von *Projektionsverfahren*. Zum projizieren wird ein *Raum* benötigt.

Entscheidende Frage: Woher bekommen wir diesen Raum?

Meist wird (je nach Bedarf) der Raum vergrössert, oft Start mit *einem* Vektor. Kandidat für GLS: rechte Seite b, respektive, falls Approximation x_0 bekannt, erstes Residuum $r_0 \equiv b - Ax_0$.

Krylov-Raum Verfahren: Raum aufgespannt von den Spalten von

$$K_m = K_m(A, q) = \left[q, Aq, \ldots, A^{m-1}q\right].$$

Definition des Krylov-Raumes als Spaltenraum der Krylov-Matrix:

$$\mathcal{K}_m = \mathcal{R}\left(\left[q, Aq, \ldots, A^{m-1}q\right]\right).$$

(Natürliche) Basisvektoren gehören zur Potenziteration, Basis schlecht konditioniert. Bessere Basisvektoren durch Basistransformation:

$$K_k = Q_k R_k$$

R_k ist, falls wir die Spalten von Q_k in folgenden Schritten nicht ändern wollen, notwendigerweise eine rechte obere Dreiecksmatrix.

Iteration in den neuen Basisvektoren ohne Verwendung der natürlichen Basis wie folgt:

$$
\begin{aligned}
\left[q, AK_k\right] = \left[q, AQ_kR_k\right] = Q_{k+1}R_{k+1} = K_{k+1} \\
\left[q, AQ_k\right] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R_k \end{pmatrix} = Q_{k+1}R_{k+1}
\end{aligned}
$$

R_k als Basistransformation regulär, also

$$
\left[q, AQ_k\right] = Q_{k+1}R_{k+1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R_k^{-1} \end{pmatrix}
$$

Damit gilt *immer* mit einer Hessenbergmatrix

$$
\begin{aligned}
AQ_k &= Q_{k+1}\underline{C}_k \\
&= Q_kC_k + q_{k+1}c_{k+1,k}e_k^T.
\end{aligned}
$$

Wie C_k und Q_k berechnen?

(Grobe) Klassifizierung existierender Krylov-Raum (Reduktions-) Verfahren:

Arnoldi : Baue $\mathcal{K}(A,q)$ auf. Wähle Q als Orthonormalbasis (ONB) des Krylovraumes. C_k Hessenberg. Minimiert

$$\|\chi_{C_k}(A)q\|_2 = \|p(A)q\|_2, \quad p \in \mathbb{P}_k^k.$$

Findet minimales annihilierendes Polynom

$$\chi_{C_m}(A)q = 0, \quad \text{wenn} \quad c_{m+1,m}q_{m+1} \equiv 0.$$

Entspricht Minimalpolynom, wenn q generisch.

Lanczos : Baue $\mathcal{K}(A,q)$ *und* $\widehat{\mathcal{K}} = \mathcal{K}(\hat{A},\hat{q})$ auf, wobei $\hat{A} = A^T$ oder $\hat{A} = A^H$ (äquivalent bei geeigneter Wahl von q und $\hat{q}$). Wähle Q und $\hat{Q}$ als biorthogonale Basen. C_k, $\hat{C}_k$ tridiagonal. Iteration kann zusammenbrechen (Look-Ahead, Deflation).

Angepasste Verfahren.

Die genannten Verfahren achten nicht auf die Struktur (höchstens implizit). Spezialfälle:

Matrix symmetrisch reell : Lanczos = Arnoldi $\Rightarrow$ **symmetrischer Lanczos**. C_k symmetrisch tridiagonal.

Matrix Hermitesch : Lanczos = Arnoldi $\Rightarrow$ **Hermitescher Lanczos**. C_k Hermitesch tridiagonal.

Das war es im Groben und Ganzen mit Arnoldi = Lanczos. Nach Faber & Manteuffel (einseitige) 3-Term Rekursion nur für normale Matrizen mit Eigenwerten auf einer Geraden in komplexer Ebene.

Angepasste Verfahren (Wahl des Startvektors, Ausnutzung von bekannten Symmetrien):

Matrix P-symmetrisch : Angepasste Lanczos Verfahren, Freund et al.

Matrix symmetrisch Toeplitz : Spezieller Lanczos (Voß, Mackens).

Matrix Hamiltonisch : Spezieller Lanczos (Benner, Faßbender), spezieller Arnoldi (Kreßner, Mehrmann).

Matrix symplektisch : Spezieller „Lanczos“, C_k Butterfly-form, symplektisch, breakdown möglich (Banse, Bunse-Gerstner, Faßbender, Benner).

Arbeit an nichtlinearen Aufgaben. Neue Ideen: neuartige Krylov-Raum Verfahren (generalisierte Krylov-Räume, Bai et al.).

Wo bleiben die normalen Matrizen?

Hermitesche (symmetrische) Matrizen haben eine unitäre (orthogonale) Eigenbasis und reelle Eigenwerte. Damit sind die Eigenwerte bestens konditioniert.

Eigenwerte von normalen Matrizen sind ebenso optimal konditioniert, da ebenso immer eine unitäre Eigenbasis wählbar ist. Also sollte man doch denken, es gäbe ein passendes Krylov-Raum Verfahren?

Nein. Probleme:

Arnoldi : C_k i.A. nicht normal und in aller Regel vollbesetzt Hessenberg.

Lanczos : nur unstabile Variante mit zwei voneinander unabhängigen Startvektoren.

Siehe hierzu Artikel von Huckle (Arnoldi) und Sätze von Faber & Manteuffel (Lanczos).

N sei eine normale Matrix, dann ist der Selbstkommutator gleich Null:

$$[N, N^H] = NN^H - N^H N = 0.$$

Nur eine von 90 äquivalenten Bedingungen [Grone et al. (1987), Elsner & Ikramov (1997)], meist Form der Definition, Bedingung Null.

Für weitere Bedingung: Definition von Hermiteschem H und K durch

$$N = H + iK, \quad \text{wobei} \quad H = \frac{1}{2}(N + N^H) \quad \text{und} \quad K = \frac{1}{2i}(N - N^H),$$

die sogenannte *Toeplitz* oder auch *Kartesische Zerlegung*.

Bedingung 21 (Kommutator von K, H gleich Null) hier interessant:

$$[K, H] \equiv KH - HK = 0$$

(Dieser Sachverhalt folgt aus $[N, N^H] = 2i[K, H]$.)

Idee I: Akkomodation des Verfahrens.

Krylov-Raum Verfahren werden verwendet, um nur Matrix-Vektor Multiplikationen mit A und evtl. A^H auszuführen, die die Nullstruktur von A nicht beeinflußen. Wer sagt, daß man *einen* Raum nur mit Multiplikation mittels *einer* Matrix aufbauen muß?

Artikel von Ludwig Elsner & Khakim Ikramov (1994): Verwende *generalisierten* Krylov-Raum $\mathcal{K}(A, A^H; q)$ gebildet aus Sequenz

$$\underbrace{q}_{\text{Schicht } 0}, \underbrace{Aq, A^H q}_{\text{Schicht } 1}, \underbrace{A^2 q, A^H A q, A A^H q, A^{2H} q}_{\text{Schicht } 2}, A^3 q, \ldots$$

Formal: Dazu nach [Horn/Johnson I] Definition von *Worten in zwei Variablen*:

$$W(s,t) \equiv s^{m_1} t^{n_1} s^{m_2} t^{n_2} \cdots s^{m_k} t^{n_k}$$

mit $m_i, n_i \in \mathbb{N}_0$.

Der *Grad* eines Wortes ist die Summe der m_i und n_i. Mit diesen Definitionen ist Schicht m gegeben durch die Vektoren

$$u = W(A, A^H)q, \quad \text{wobei} \quad \deg(W) = k.$$

Der $m$te generalisierte Krylov-Raum wird definiert durch

$$\mathcal{L}_m(A, q) = \operatorname{span}\left\{\cup_{d(W)\leq m} W(A, A^H)q\right\}.$$

Bezeichnungen: Dimension von $\mathcal{L}_m$ bezeichnet mit ℓ_m, $w_m = \ell_m - \ell_{m-1}$ ist Breite der $m$ten Schicht.

$N = A$ normal: Alle Worte in der $m$ten Schicht gegeben durch

$$u = N^\alpha \left(N^H\right)^\beta q, \qquad \alpha + \beta = m.$$

Also Breite beschränkt durch

$$w_m \leq m + 1.$$

Falls mehr Eigenschaften, Breite weiter beschränkt:

$$\begin{aligned} w_m &\leq 1, \quad \text{falls} \quad N = \alpha H + \beta I, \quad H = H^H, \\ w_m &\leq 2, \quad \text{falls} \quad N = \alpha Q + \beta I, \quad QQ^H = I. \end{aligned}$$

Idee: Baue sukzessive eine Orthogonalbasis Q_k des Raumes $\mathcal{L}_m$ auf.

Beobachtung:

$$\begin{gathered} x \in \mathcal{L}_m \quad \Rightarrow \quad Ax, A^H x \in \mathcal{L}_{m+1}, \\ Aq_l \perp \mathcal{L}_{m-2}, \quad A^H q_l \perp \mathcal{L}_{m-2}. \end{gathered}$$

Erster Teil klar nach Konstruktion, zweiter Teil ($y \in \mathcal{L}_{m-2}$):

$$\begin{aligned} \langle Aq_l, y \rangle &= \langle q_l, A^H y \rangle = 0, \\ \langle A^H q_l, y \rangle &= \langle q_l, Ay \rangle = 0. \end{aligned}$$

Definition der *generalisierten Lanczos-Prozedur*:

1. Wähle Zufallsvektor $q = q_1$.
2. Nimm an, daß bereits die Vektoren $q_1, \ldots, q_m$ der orthogonalen Basis von $\mathcal{L}_s$ gefunden wurden, wobei $q_k, \ldots, q_m$ mittels der $s$ten Schicht konstruiert wurden. Für diese Vektoren:

   a) Berechne $w = Aq$.

   b) Orthogonalisiere w gegen die bereits akzeptierten Lanczos Vektoren q_i gehörend zu den Schichten $s-1, s, s+1$.

   c) Wenn, nach Schritt b), der Vektor w nicht Null ist, nimm ihn als Lanczos Vektor der $(s+1)$sten Schicht.

   d) Bilde für den Vektor q in a) $w = A^H q$.

   e) Für den in d) erhaltenen Vektor w wiederhole Schritte b) und c).

N in Basis Q Matrix mit wachsender Bandbreite, Transformation von N mittels Q auf *kondensierte Normalform*.

Breite gegeben durch w_m. Dazu bewiesen:

Theorem: Für alle m,

$$w_{m+1} \leq w_m + 1.$$

Verwendung als Approximation. Die führenden Unterabschnittsmatrizen sind leider *nicht normal*, aber nur um einen kleinen Rang.

Konvergenztheorie ist verwandt mit der Theorie der (annihilierenden) polyanalytischen Polynome (verwendet von Marko Huhtanen).

Dazu kurz ein paar Anmerkungen auf den nächsten Seiten ...

Sei p charakteristisches Polynom von normaler Matrix N. Dann in reeller Arithmetik

$$p(z) = f(x, y) + ig(x, y)$$

mit bivariaten Polynomen f, g vom Grade n.

Spektrum von N gegeben als *algebraische Untervarietät* des $\mathbb{R}^2$:

$$f(x, y) = 0, \quad g(x, y) = 0.$$

Polynome vom Höchstgrad k bezeichnet mit $\mathcal{P}_k$. Polyanalytische Polynome vom Höchstgrad k bezeichnet mit $\mathcal{PP}_k$ gegeben als

$$p(z) = \sum_{j=0}^{k} h_j(z)\overline{z}^j, \quad h_j \in \mathcal{P}_{k-j}.$$

Polyanalytische Monome definiert als $z^j\overline{z}^l$. Klar: $\mathcal{P}_k \subset \mathcal{PP}_k$. Nullstellen:

$$q(z) = z\overline{z} + 1, \qquad w(z) = z\overline{z} - 1.$$

Krylov-Raum: Bijektion zwischen Polynomen $p(A)q$ und Vektoren aus dem Krylov-Raum $x \in \mathcal{K}(A, q)$.

Generalisierter Krylov-Raum: Identifikation von Vektoren mit polyanalytischen Polynomen möglich, da N und N^H vertauschen.

Definition: Ordnung:

$$(j_1, l_1) > (j_2, l_2) \equiv \begin{cases} j_1 + l_1 > j_2 + l_2 \\ j_1 + l_1 = j_2 + l_2, \quad j_1 > j_2. \end{cases}$$

Minimales polyanalytisches Polynom: monisches polyanalytisches Polynom kleinsten Grades, das N annihiliert ($p(N) = 0$).

Inklusionstheorem: Sei $N \in \mathcal{N}$ und $p \in \mathcal{PP}$. Dann

$$\sigma(N) \subset \{z \in \mathbb{C} : |p(z)| \leq \|p(N)\|_2\}.$$

Definition: Irreduzibles annihilierendes polyanalytisches Polynom (APP) für N definiert als monisches APP nicht teilbar durch anderes monisches APP.

Definition: Algebraische Untervarietät des $\mathbb{R}^2$ definiert durch (polyanalytische) Polynome $\{p_k\}_{k=1}^s$ bezeichnet mit

$$V(\{p_k\}_{k=1}^s) \equiv \{z \in \mathbb{C} : p_k(z) = 0 \ \forall\ 1 \leq k \leq s\}.$$

Huhtanens Hauptresultat: Seien $\{p_k\}_{k=1}^s$ die sukzessive berechneten irreduziblen APP von N. Dann gilt

$$V(\{p_k\}_{k=1}^s) = \sigma(N).$$

Beweise durch Betrachtung des (beachte $N^H = q(N)$) Krylov-Raumes

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_d(N, I) &\equiv \text{span}\left\{I, N, N^2, \ldots, N^{d-1}\right\} \\ &= \text{span}\left\{I, N^H, N, N^{2H}, NN^H, \ldots\right\}\end{aligned}$$

mit innerem Produkt $\langle A, B\rangle \equiv \text{Spur}(AB^H)$.

Idee II: Assimilation der Problemstellung.

Marko Huhtanen: normale Matrizen mittels Toeplitz Zerlegung in Hermitesche und schiefhermitesche Matrizen. Dann Krylov Raum Verfahren auf Hermitischem Teil von N. Geht zur Näherung von Eigenwerten und zur approximativen GLS Lösung. Dabei sind die implizit bestimmten Näherungen *normal*.

Verwende die Toeplitz Zerlegung.

Theorem: Die folgenden Beschreibungen sind äquivalent:

$$\begin{aligned}\mathcal{N} &\equiv \{N \text{ ist normale Matrix}\}\\ &= \{H + iK \,:\, H, K \text{ sind Hermitesch}\}\\ &= \operatorname{clos}\{H + ip(H) \,:\, H \text{ Hermitesch}, p \text{ reelles Polynom}\}\,.\end{aligned}$$

Also: bis auf Nullmenge ist der schiefhermitesche Teil ein reelles Polynom im Hermiteschem Teil.

Erweiterung der Toeplitz Zerlegung: Sei Z normal. Dann gilt für eine offene dichte Untermenge von $[0, 2\pi)$

$$e^{i\theta} Z = H_\theta + i p_\theta(H_\theta)$$

für ein reelles Polynom p_θ.

Definition: Die um θ gedrehte Toeplitz Zerlegung von Z ist definiert als

$$Z = e^{-i\theta} H_\theta + i e^{-i\theta} K_\theta.$$

Bemerkung: i.A. sind $e^{-i\theta} H_\theta$ und $e^{-i\theta} K_\theta$ nicht Hermitesch. Aber die Phase $e^{-i\theta}$ behindert die Rechnung nicht.

Idee: Approximiere die Eigenwerte von H **und** das Polynom p mittels Hermiteschem Lanczos, bilde Näherungen als

$$\tilde{\sigma}(A) = \sigma(T_j) + i p(\sigma(T_j)).$$

Eigenwert Approximation klar, p bestimmt aus $\|(K - p(H)) q_0\| = \min$.

Hermitesches Lanczos Verfahren für normale Matrizen:

Initialisierung: Sei $Z = H + iK$ und q_0 mit $\|q_0\|_2 = 1$ gegeben. Setze $\beta_{-1} = 0$, $p(\lambda) = \langle Kq_0, q_0 \rangle$, $p_{-1}(\lambda) = 0$ und $p_0(\lambda) = 1$.

Für $j = \{1, \ldots, k\}$**:** (k selbstgewählt)

- Berechne mit H mittels Hermiteschem Lanczos α_j, β_j, q_j.
- Berechne $p_j(\lambda) = (\lambda - \alpha_j)/\beta_j \cdot p_{j-1}(\lambda) - \beta_{j-2}/\beta_j \cdot p_{j-2}(\lambda)$.
- Berechne $\gamma_j = \langle Kq_0, q_j \rangle$.
- Setze $p(\lambda) = p(\lambda) + \gamma_j p_j(\lambda)$.
- Berechne $\sigma(T_j) + ip(\sigma(T_j))$.

Dabei p oft schon früh genähert, Beispiele bei Huhtanen.

Näherungen *normal*. Zusätzlich sinnvoll: Drehung θ anpassen.

Was tun, wenn GLS zu lösen?

$$Nx = b$$

Arnoldi/GMRES:

$$\|Np_{j-1}(N)b - b\|_2 = \text{min}$$

Ausnutzen: Normale Matrix ist generisch Polynom im Hermiteschem Teil.

$$\|Np_{j-1}(H)b - b\|_2 = \text{min}$$

N und H vertauschen (warum?):

$$\|p_{j-1}(H)Nb - b\|_2 = \text{min}$$

Krylov-Raum:

$$\mathcal{K}(H, Nb) = \text{span}\left\{Nb, HNb, H^2Nb, \ldots\right\}$$

Wie GLS mittels $\mathcal{K}(H, Nb)$ lösen, wenn rechte Seite b, nicht Nb?

Lösung: Stelle b so gut es geht im Raum dar. Also: Sei $\widehat{Q}_k$ die durch das Lanczos Verfahren mit Matrix H und Startvektor $Nb/\|Nb\|_2$ berechnete ONB. Dann gilt:

$$p_{j-1}(H)Nb = \sum_{k=0}^{j-1} \langle b, \widehat{q}_k \rangle \widehat{q}_k.$$

Dieses ist aber nicht die Lösung des GLS, sondern der Wert, an dem das Minimum angenommen wird. Also (theoretisch) Inversion von N:

$$x_{j-1} = \sum_{k=0}^{j-1} \langle b, \widehat{q}_k \rangle N^{-1} \widehat{q}_k.$$

Definiere $Q_k = N^{-1}\widehat{Q}_k$. Dann $q_0 = b/\|Nb\|_2$ und $Nq_k = \widehat{q}_k$ (Skalarprodukt).

Wenn man noch zusätzlich das GLS um einen Winkel θ dreht, erhält man den Algorithmus auf der nächsten Seite ...

Hermitescher Lanczos (Odir) zur Lösung von $Nx = b$ (bei gegebenem θ):

Initialisierung: Für $N = e^{-i\theta} H_\theta + i e^{-i\theta} K_\theta$ und Approximation x_{-1}, setze $r = b - Nx_{-1}$, $q_{-1} = 0$, $q_0 = r/\|Nr\|_2$, $x_0 = \langle r, Nq_0\rangle q_0$, $r_0 = r - Nx_0$.

Für $k = \{1, \dots, j-1\}$**:** (j selbstgewählt)

$$q_k = H_\theta q_{k-1} - \langle H_\theta N q_{k-1}, N q_{k-1}\rangle q_{k-1} - \langle H_\theta N q_{k-1}, N q_{k-2}\rangle q_{k-2}$$

$$q_k = q_k / \|N q_k\|_2$$

$$\alpha_k = \langle r_{k-1}, N q_k\rangle$$

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_k q_k$$

$$r_k = r_{k-1} - \alpha_k N q_k$$

Neustart: Ersetze x_{-1} durch $x_{-1} + x_{j-1}$ und wähle neues θ.

Résumé.

Generell:

Assimilation (der Problemstellung) und Akkomodation (des Verfahrens) haben (offensichtliche) Vor- und Nachteile.

Speicher:

Lanczos: 3, Arnoldi: d, Elsner & Ikramov: $\sqrt{12.5d}$ (Durchschnitt)

Beide Verfahren sind noch nicht vollständig verstanden:

Die Normalform von Elsner & Ikramov kann verwendet werden, um Ritzwerte und Ritzpolynome zu definieren. Die Relation der Ritzpolynome zu den APP ist nicht klar.

Es gibt noch keine Fehleranalysen.

“Best of both worlds?”

Literatur.

zur Akkomodation . . .

R. Grone, C. R. Johnson, E. M. Sa, und H. Wolkowicz, *Normal matrices*, LAA **87** (1987), 213–225.

L. Elsner und Kh. D. Ikramov, *On a condensed form for normal matrices under finite sequences of unitary similarities*, Preprint PR 94-047 SFB 343 (1994) und LAA **254** (1997), 79–98.

L. Elsner und Kh. D. Ikramov, *Normal matrices: an update*, Preprint PR 97–003 SFB 343 (1997) und LAA **285** (1998), 291–303.

Marko Huhtanen und Rasmus Munk Larsen, *Exclusion and inclusion regions for the eigenvalues of a normal matrix*, SIMAX **23**(4) (2002) 1070–1091.

Marko Huhtanen, *Orthogonal Polyanalytic Polynomials and Normal Matrices*, Stanford University, SCCM Technical Report SCCM-00-08 und Mathematics of Computation, **72**(241) (January 2003), 355–373.

... zur Assimilation ...

Marko Huhtanen, *A stratification of the set of normal matrices*, SIMAX **23**(2) (2001) 349–367.

Marko Huhtanen, *A Hermitian Lanczos method for normal matrices*, SIMAX **23**(4) (2002) 1092–1108.

... und im Allgemeinen:

R. A. Horn und C. R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 1985.

R. A. Horn und C. R. Johnson, *Topics in Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 1991.