

Podmienka ortogonality dá:

$$Q_n^* Q p^n(H) Q^* b = 0$$

$p^n(A)$

$$r_1 = b / \|b\|$$

(5.7)

$$Q^* b = \|b\| e_1$$

$Q_n^* Q$, $p^n(H)$, $Q^* b$ → prvý a zvyšok prvého stĺpca
 $n \times n$ s diagonálou 1 \uparrow násobok e_1 $p^n(H)$ musí byť nula.

Vzhľadom na štruktúru H (pravý horný roh χ_2 nevstupuje do hry) až do momentu $s^{exp. n+1}$

aj prvý stĺpec $p^n(H_n^a)$ musí byť nulový.

Vďaka Cayley-Hamiltonovej vete vieme že χ_{H_n} má túto vlastnosť.

Na druhej strane, ak by existoval ktorýkoľvek monický polynóm S

$p^n(A)b \perp \chi_n$, potom viediel $p^n - \chi_{H_n}$ by dal

nenulovej $q(A)$ stupňa $\leq n-1$ s $q(A)b = 0$ -

spor s tým, že χ_n máo plnú hodnotu.

(kombinácia $b, Ab, \dots, A^{n-1}b$)

Toto tvrdenie nám dáva novú interpretáciu Ritzových hodnôt

(koreňov χ_{H_n}) - sú to korene optimálneho polynómu z problému 34.3

Vlastnosti invariencie

sem 16.3.2021

Predstá veta ponúka pohľad na základné vlastnosti Arnoldiho

iterovania: trieda monických polynómov P^n je invaričná

vzhľadom na posunutie $z \mapsto z + \alpha$, teda Arnoldiho

iterovanie je tiež translácie invariantné.

(Na viediel od iteratívnych algoritmov pre riešenie $Ax=b$, ako GMRES, Arnoldiho iterovanie "nevadí počítať")

Táto vlastnosť invariácie môže zhrnúť v tvrdení: 6.1/2
(dôsledok 34.1, bez dôkazov)

lema 34.2

Správne Arnoldiho iterovanie s maticou $A \in M_{m,m}(\mathbb{C})$

Translačná invariácia: Ak A zmeníme na $A + \sigma I$ pre
 $\sigma \in \mathbb{C}$ a b je bezrozmerý, potom sa Ritzove hodnoty
zmenia z $\{\theta_j\}$ na $\{\theta_j + \sigma\}$ v každom kroku.

Škálovacia invariácia Ak A zmeníme na σA pre $\sigma \in \mathbb{C}$,
 b bezo zmeny, potom sa Ritzove hodnoty zmenia na
 $\sigma \{\theta_j\}$.

Invariácia vzhľadom na unitárnu podobnosť

Ak A zmeníme na $U A U^*$ pre nejakú unitárnu U a
 b zmeníme na $U b$, potom sa Ritzove hodnoty $\{\theta_j\}$
nezmenia.

Vo väčšom troch prípadoch sa Ritzove vektory t.j. $Q_n y_j$
zodpovedajúce n. vektorom y_j matice H_n transformáciami
zmenia.

Vďaka Schurmu vieme, že každá matica je unitárne
podobná Hornej trojuholníkovej. Táže vďaka invariácii vzhľadom
na unitárnu podobnosť by pre skúmanie konvergenzie
Arnoldiho iterovania (Ritzových hodnôt) stačilo (v princípe)
pozerať sa na horné trojuholníkové matice. (nenormálnom)

(diagonálne vlné ustátená, lebo v uhermitovskom svete)
vlné o matici ~~oproti~~ vlné hodnoty usporiadajú vlné

Ako Arnoldiho Iterovanie nachádza vl. hodnoty

58
6/1/2

Teda môžeme prejsť k otázke z názvu tejto lekcie.

Podľa vety 34.1 je "cieľom" Arnoldiho iterovania uviesť polynomidný aproximačný problém, resp. nájsť ^{problem} najmenších stupňov s kvadratickým podpriestorom.

Ak Arnoldiho algoritmus nachádza vl. hodnoty, je to odlišný produkt ^{riešenia} týchto problémov.

Ako teda súvisí polynomidná aproximácia s vl. hodnotami A ?

Súvis je asi takýto:

ak chceme nájsť polynóm, pre ktorý je $P^n(A)$ malé, efektívna metóda bude vybrať p^n , ktorého korene sú blízko vl. hodnotám A (lebo Cayley-Hamilton dáva $\chi_A(A) = 0$ resp. $m_A(A) = 0$)

Uvažujme extrémny prípad: A je diagonalizovateľná a má len $n \ll m$ rôznych vl. hodnot. Potom m_A minimálny polynóm je stupňa n . — podľa vety 34.1 po n krokoch nájdeme všetky vl. hodnoty presne, t.j. aspoň ak b obsahuje zložky zo všetkých vl. podpriestorov A (inak bude min. polynóm pre b nižšieho stupňa q)
(K_n nebude mať plnú hodnotu.)

Teda po n krokoch Arnoldiho iterovania dá presne minimálny polynóm.

V praxi sa deje niečo podobné — v tomto prípade sú však Ritzove hodnoty zložené s vl. hodnotami len približne

a namiesto minimálneho polynómu dostávame len
"pseudo-minimálny polynóm", t.j. P^n s $\|P^n(A)\|$ malou.

Arnoldiho lemniskaty

Konvergencia sa dá graficky ilustrovať kvadratickým lemniskát
v komplexnej rovine.

Lemniskáta je krivka, alebo množina kriviek:

$$\{z \in \mathbb{C} \mid |P(z)| = C\}$$

kde P je polynóm a C reálna konštanta - (t.j. reálne
kontúry okolo
koreňov)

Ak P je polynóm P^n z Arnoldiho iterovania v kroku n a

C má hodnotu

$$C = \frac{\|P^n(A) b\|}{\|b\|},$$

potom sa tieto krivky môžu nazývať Arnoldiho lemniskaty.

Pre zväčšujúce sa n komponenty lemniskát budú ohraničovať
extrémne v. hodnoty matice A a potom sa sčerkujú do bodu
- q v. hodnoty.

Pre ilustráciu: nech $m=100$, zložky sú i.i.d (nezavislé
z normálneho rozdelenia s priemerom 0 a odchýlkou $\frac{1}{\sqrt{m}}$.

A je reálna - v. hodnoty sú popäťorane komplexné alebo
reálne. Voľba odchýlky dá, že v. hodnoty vyjdú

komplexne distribované v kruhu $|z| \leq 1$ (cvič. 12.3)

Vytvoríme v. hodnotu mimo, zmenou a_{11} na 1.5.
(obrázky)

Použitím Arnoldiho iterování s náhodným vektorem q ,
nájdeme matice H_n , ich charakteristický polynom a
lemniskáty (pro $n=5,6,7,8$)

5.9
6.2

pro $n=1$ je to kruh, pro $n=5$ má vybitenou směr λ ,
pro $n=6$ se komponent oddělí a dáleším iterováním sevrkne.

Geometrická (lineární) konvergence

Za stejných podmínkách bude konvergence Arnoldiho odhadů
vl. hodnot konvergovat k vl. hodnotám A geometricky.

Porozumění stále nie je úplné a ~~teoretické~~ teoretické
výsledky by možno boli púliš neprehľadné.

Pozrime sa na numerickú ilustráciu a jej vysvetlenie.

Z obrázku lemniskát sa ~~veda~~ ^{práve} vďaka konvergencii púliš,
posúdiť.

V grafe 34.4. máme $|\lambda^{(n)} - \lambda|$ na logaritmickej škále

- konvergenca je geometrická - vidíme lineárnu čiaru na log-grafe.

Po 50-tich iteráciách je presnosť na 12 číslic, a niečo

podobné by sa dostalo aj pre A rozmer 1000×1000 .

Dá sa byť trochu viac kvalitatívny, počas prvých 12-tich
iterácií môžeme konvergenciu aproximovať ako

$$|\lambda^{(n)} - \lambda| \approx \left(\frac{2}{3}\right)^n$$

vysvetlenie je nasledovné:

aly sme minimalizovali $\|P^n(A)b\|$

p^n musí být zhruba minimum pro každou z vlastních hodnot matice A .

Zoberme $p(z) = z^{n-1}(z - \tilde{\lambda})$, kde $\tilde{\lambda}$ je nejdeš o něco blíže λ
(maximální rel. hodnota $\lambda \approx 1.4852 \approx \frac{3}{2}$)

Pro rel. hodnoty vně jednotkové kružnice, $|p(z)|$ je větší než 1
alebo menší. Pro $z = \lambda$ ale máme:

$$|p(\lambda)| \approx \left(\frac{3}{2}\right)^n |\tilde{\lambda} - \lambda|$$

(vímalo by sa to, ak by $\lambda = \frac{3}{2}$). Ak je n veľké, $\left(\frac{3}{2}\right)^n$ je
obrovšče. Aby $|p(\lambda)|$ bolo väčšie než 1, $|\tilde{\lambda} - \lambda|$ musí byť
malé, väčšie $\left(\frac{2}{3}\right)^n$.

Z ilustrácie vidno ďalšiu typickú vlastnosť ^{krytových podm.} _{aproximácií}
po úvodnom tučte iterácii sa konvergencia zrychljuje.

→ iterovanie vyhladá aj ďalšie z rel. hodnot na ostatnej strane spektra.

Pro rozmery $n=300$ by spektrum A bolo hustejšie a
oblast rel. hodnot by vyplňoval jednotkovú kružnicu tesnejšie -
zrychlenie by sme pozorovali po 50-tich iteráciách.

GMRES

V predchádzajúcej lekcií sme ukázali ako Arnoldiho iterovanie (proces) vieme použiť pre najmenšie vl. hodnoty. V tejto lekcií sa pozrieme na to, ako ho možno využiť pri riešení rovníc $Ax=b$. Štandardný algoritmus tohto druhu sa nazýva GMRES - "generalized minimal residuals".

Reziduálna minimalizácia v \mathcal{K}_n

(minimalizácia reziduátor)

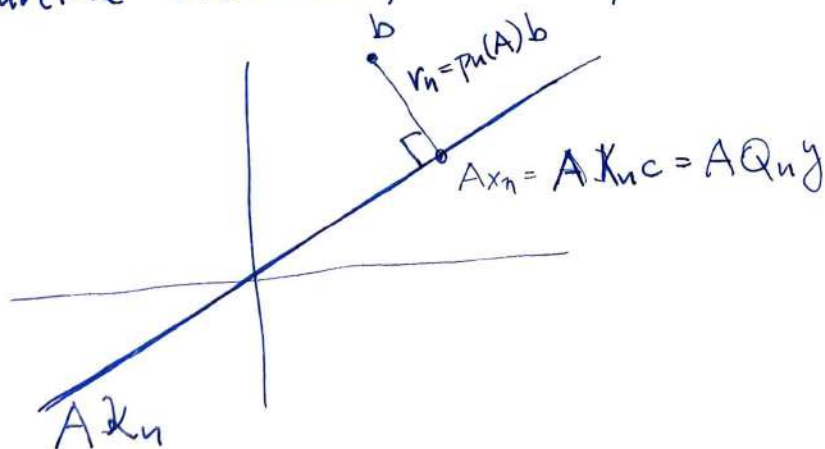
$A \in M_{m,m}(\mathbb{C})$ - štvorcová, $b \in \mathbb{C}^m$ a $\mathcal{K}_n = \langle b, Ab, \dots, A^{n-1}b \rangle$ je krylovov podpriestor. Predpokladajme navyše, že A je regulárna, aby systém $Ax=b$ mal riešenie $x_* = A^{-1}b$.

Mýšlienka GMRES je jednoduchá - v n -tým kroku aproximujeme

x_* vektorom $x_n \in \mathcal{K}_n$, ktorý minimalizuje normu reziduátu

$$r_n = b - Ax_n.$$

T.j. x_n určuje riešenie problému najmenších štvorcov:



Zjavný postup pre tento problém by bol nasledovný:

$K_n =$ je $m \times n$ krylovova matica, potom

$$AK_n = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ A^1 b & A^2 b & \dots & A^n b \\ | & | & & | \end{bmatrix}$$

jej stĺpcový priestor je $A \cdot K_n$. Máme teda nájsť vektor $c \in \mathbb{C}^n$:

$$\|AK_n c - b\| = \text{minimum} \quad \left(\|\cdot\| \text{ je } \begin{matrix} 2\text{-norma} \end{matrix} \right)$$

- to by šlo pomocou QR faktorizácie AK_n

(podobne ako $K_n = Q_n R_n$) a nahľadáme $c \rightarrow x_n = K_n c$.

Táto procedura je však nestabilná, počítali by sme aj R , ktoré netreba.

Pomocou Arnoldiho iterovania (Algorithmus 33.1) vyrobíme postupne matice Q_n , ktorých stĺpce ^{napätím} generujú krylovove priestory K_n .

Vyjadríme x_n ako $x_n = Q_n y$ a vesieme

$$\|A Q_n y - b\| = \text{minimum}.$$

- keďže problém vyzerá ako $m \times n$, n skutočnosťí bude ale typu $(n+1) \times n$ vďaka štruktúre krylových priestorov.

Oba vektory totiž patria do stĺpcového priestoru Q_{n+1}

(V lekcii 33 sme mali: $A Q_n = Q_{n+1} \tilde{H}_n$) teda vesieme

$$\|Q_{n+1} \tilde{H}_n y - b\| = \text{min.}$$

$$\left(a \cdot b \in Q_1 = \left\{ \frac{b}{\|b\|} \right\} \right)$$

Môžeme teda prenásobiť zľava Q_{n+1}^* (a začať znovu)

$$\| \tilde{H}_n y - Q_{n+1}^* b \| = \text{min.}$$

Levšie ^{konštrukcia} krylových priestorov Q_n startujeme od vektora $q_1 = \frac{b}{\|b\|}$,

keďže $Q_{n+1}^* b = \|b\| \cdot e_1$. Takže dostávame takúto

vezia problemu najmenšich štvorcov pre GMRES:

6.4

$$\| \tilde{H}_n y - \|b\|e_1 \| = \text{minimum.}$$

V n -tom kroku GMRES riešime tento problém pre y a potom zvolíme $x_n = Q_n y$.

Fungovanie GMRES

Takto dostaneme GMRES algoritmus:

Algoritmus 35.1 GMRES

$$q_1 = b / \|b\|$$

pre $n=1, 2, 3, \dots$

[Arnoldiho iterácia - Hypoza \tilde{H}_n, q_{n+1}]
Alg 33.1

Nájst y minimalizujúce $\| \tilde{H}_n y - \|b\|e_1 \|$ ($= \|r_n\|$)

$$x_n = Q_n y$$

V každom kroku GMRES minimalizuje normu reziduálu $v_n = b - Ax_n$ pre $x_n \in \mathcal{K}_n$. $\|v_n\|$ naplne q_n výpočte q_n .

($v \in \mathbb{C}^m$, veľkosť hľadat $v \in \mathbb{C}^m$)

- "Nájst y " je $(n+1) \times n$ problém najmenšich štvorcov s Hessenbergovou maticou, dá sa riešiť pomocou QR rozkladu s nákladmi $O(n^2)$ flopar.

Dá sa šetriť ešte viac, keďže QR rozklady matic $\tilde{H}_1, \tilde{H}_2, \tilde{H}_3, \dots$ veľkosť vždy počítať narovo, ale ^{pre \tilde{H}_m sa} ~~sa~~ dostat aktualizácia QR faktORIZÁCIE \tilde{H}_n .

- V tom prípade stačí jediná Givensova rotácia a $O(n)$ veľá práce.

GMRES a polynomiálna aproximácia

Počas poslednej prednášky sme videli, že výpočet vl. hodnôt

Arnoldiho iterovaním súvisí s aproximačným problémom:

nájsť $p \in P_n$, minimalizujúce $\|p(A)b\|$.

P_n bola množina monických polynómov stupňa n .

GMRES iterovanie tiež rieši aproximačný problém,

ktorým ale množina polynómov zoberieme:

$$P_n = \{ \text{polynóm stupňa } \leq n, \quad p(0) = 1 \}$$

(t.j. absolútnej černej je 1, aby $p(0)b = b$ bola prvá strana)

(~~aj~~ normalizácia je teda $c_0 = 1$ a nie $c_n = 1$)

normalizácia
 $v = 0$

normalizácia $v = \infty$

Odhadované riešenie $x_n \in \mathbb{C}^n$ sa dá zapísať ako

$$x_n = q_n(A)b,$$

kde q_n je polynóm stupňa $n-1$, koeficienty by sme

dostali z úradvenic $x_n = c_0 b + c_1 A b + \dots + c_{n-1} A^{n-1} b$.

Residuár r_n bude $r_n = b - A x_n = (I - A q_n(A))b$.

Zvoliac $p_n(z) = 1 - z q_n(z)$ máme $r_n = p_n(A)b$, pre

$$p_n \in P_n.$$

GMRES proces vyberá ~~polynóm~~ koeficienty polynómu p_n ,

ktorý minimalizuje normu residuálu.

GMRES aproximačný problém. Nájsť $p_n \in P_n$, pre ktoré

$$\|p_n(A)b\| = \text{minimum}$$

Podobne ako pre Arnoldikovo iterovanie, aj GMRES
spĺňa niektoré vlastnosti invariančnosti:

Veta 35.1 Použitie GMRES iterovanie pre maticu $A \in \mathbb{R}^{m,m}(\mathbb{C})$.
Invariancia vzhľadom na škálovanie Ak A zmeníme na σA pre
 $\sigma \in \mathbb{C}$ a b na σb , reziduály $\{r_n\}$ sa zmenia na $\{\sigma r_n\}$.

Invariancia vzhľadom na unitárnu podobnosť
Ak A zmeníme na $U A U^*$ pre nejakú unitárnu U a
 b sa zmení na $U b$, reziduály $\{r_n\}$ sa zmenia na
 $\{U^* r_n\}$.

GMRES nie je invariálny vzhľadom na posunutie, keďže
normalizácia $p(0) = 1$ závisí od bodu 0, ktorý by sme
prípadne posunuli.
→ Skôr je to naopak, správanie ^{silno} závisí od polohy počiatku -
od čísla podmienenosti A .

Konvergencia GMRES

Chceli by sme vedieť ako rýchlo GMRES konverguje,
koľko krát treba pre pokles $\|r_n\|/\|b\|$ k 10^{-3} alebo 10^{-16} ...

V praxi to bude závisieť od tzv. predpodmieňovania
(preconditioning - predpríprava?). Z matematického hľadiska
ide o skúmanie vlastností A , ktoré ovplyvnia veľkosť $\|r_n\|$.

Najprv dve pozorovania: GMRES konverguje monotónne:
 $\|r_{n+1}\| \leq \|r_n\|$

Tvorcom je zväčšené podpriestory, cez ktorý minimalizujeme:
 $x_n \in x_{n+1}$

(tiež si treba uvedomiť, že $P_n \subseteq P_{n+1}$, ale $p_n \notin P_{n+1}$)

Druhé pozorovanie: po n krokoch učíte najľahšie presné riešenie

$$\|r_n\| = 0$$

(bez zaokrúhľovacích chýb)

- Keď pre generické A a b dostaneme $K_n = \mathbb{C}^n$

(ak by $b \in K_n$ pre $n < n$, konvergencia nastane skôr).

Toto pozorovanie však nie je veľmi praktické, lebo potreby presnej dostatočnú presnosť pre $n < n$.

Pre lepšie odhady konvergencie sa pozrieme na problém polynomiálnej aproximácie. $\|p_n(A)b\| = \text{minimum}$.

Vieme:
$$\|r_n\| = \|p_n(A)b\| \leq \|p_n(A)\| \|b\|.$$

Okrem prípadov/problémov, kde pravá strana má špeciálnu štruktúru súvisiacu s A bude mať rozhodujúcu úlohu maticová norma $\|p_n(A)\|$.

Teda veľkosť, ktorá ^{určí} rozhoduje rýchlosť konvergencie bude:

$$\frac{\|r_n\|}{\|b\|} \leq \inf_{p \in P_n} \|p_n(A)\|$$

To vedie k matematicky zaujímavej otázke: pre danú maticu A a číslo n , ako malé môže $\|p_n(A)\|$ byť?

Táto otázka je základom veľkej väčšiny analýz konvergencie metód riešenia systémov pomocou kvadrátnej podpriestoru.

Polygóny s malými hodnotami na spektre

Pro dané A a n , ako malé môže byť $\|p_n(A)\|$?

- štandardný postup - pozrieme sa na polygóny $P(z)$, ktoré sú čo najmenšie pre $\Delta(A)$ - spektrum matice A a stále splývajúce podmienku normalizácie $P(0) = 1$.

Definujme: $\|P\|_S = \sup_{z \in S} |P(z)|$ pre polygón $S \subseteq \mathbb{C}$.

Predpokladajme, že A je diagonalizovateľná - $A = V\Delta V^{-1}$.

potom $\|P(A)\| \leq \|V\| \|P(\Delta)\| \|V^{-1}\| = \kappa(V) \|P\|_{\Delta(A)}$.

Spojením s odhadom pre $\frac{\|v_n\|}{\|b\|}$ dostávame:

Veta 35.2 V n -tom kroku GMRES ~~aproximácie~~ iterácie spĺňa reziduál v_n odhad:

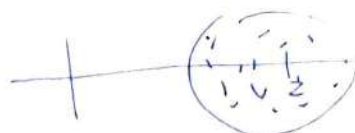
$$\frac{\|v_n\|}{\|b\|} \leq \inf_{P \in P_n} \|P(A)\| \leq \kappa(V) \inf_{P \in P_n} \|P\|_{\Delta(A)},$$

kde $\Delta(A)$ je množina vl. hodnôt A , V je diagonalizačná matica a $\|P\|_{\Delta(A)}$ podľa def. vyššie.

Strome: Ak A nie je príliš ďaleko od normálnej (t.j. $\kappa(V) \approx 1$) a ak vieme nájsť polygón P_n , pre ktoré $\|P_n\|_{\Delta(A)}$ klesá rýchlo, potom GMRES konverguje rýchlo.

Príklad A - 200×200 matice, zložená z normálneho rozdelenia s priemerom 2 a štand. odchýlkou $0.5/\sqrt{200}$
Matlab: $m=200$, $A = 2 \times \text{eye}(m) + 0.5 \times \text{rand}(m) \times \text{sqrt}(m)$

ofr. vl. hodnôt



- kruh s polomerom $\frac{1}{2}$ so stredom $z=2$.

Na obr. 35-3 vidíme kruhu konvergenzie (log $\frac{\|r_n\|}{\|s\|}$)

- dosiahne sa lineárna konvergenzia $\sim 4^{-n}$.

Ked' DBuddy?

ked'že spektrum A vyplná disk s polomerom $\frac{1}{2}$ a stredom 2 ,

$\|p(A)\|$ je ^(zhruba) minimalizovaná pre polynóm $p(z) = (1 - z/2)^n$.

Matrica $I - A/2$ je nãhodná matrica so spektrum vyplnãjúcim

kruh s polomerom $\frac{1}{4}$ (stred 0), teda $\|p(A)\| = \|(I - A/2)^n\| \approx 4^{-n}$.

Tãto matrica má dobre číslo podmienenosti, $\kappa(A) \approx 2.03$ a odchyľka od normãkosti $\kappa(V) \approx 141$.

Za priãvinných okolností máme konvergenziu pre dobre sa sprãvãjúcich sa maticu.

- presnosť na 6 cifier po 10-tich iterãciãch

Cena $10 \times 2m^2 = 8.0 \times 10^5$ flopor

Gaussova eliminãcia by bola $\frac{2}{3}m^3 \approx 5.3 \times 10^6$ flopor

zãpãd 7-nãsobnã zrychlennie sa dosiahlo naprieã tomu,

že A nemá zãradnu ryãhodnã v podobe viedkosti. a

Werner $m=200$ nie je aã takã veľkã.

Pre romãny pãhľad $Sm=2000$ by GMRES porãzil GEM

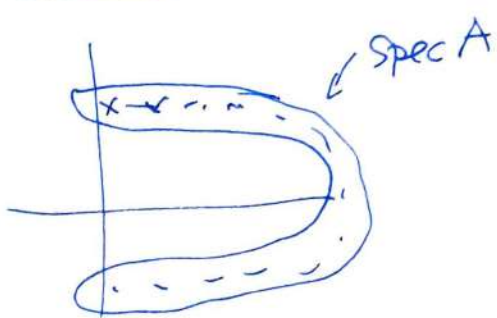
zhruba 70-nãsobnã.

Pre matice S ^{$m=2000$ a} viedkostiã 90% alebo 99% by sme

dosãli 700-nãsobnã, resp. 7000-nãsobnã zrychlennie.

Podobnã úspory v pamãti.

Příklad A sū vl. hodnoty "malé" matice A "nepříjemné" 6.7



výchla konvergence sa nedá očakávať.

→ vzorec r knihy

$$A^j = A + D$$

(A ako v minulom príklade)

↑ polgukový oblasť vl. hodností

$$D = \text{diag}(d_k), \quad d_k = (-2 + 2\sin \theta_k) + i \cos \theta_k$$
$$\theta_k = \frac{k\pi}{m-1}, \quad 0 \leq k \leq m-1$$

konvergenca bude ovčá horšia, v zásade rovnako ako

Gaussova eliminácia.

Podmienkovosť $\kappa(A) \approx 4.32$, $\kappa(V) = 54.0$, čiže pokles
rychlosti konvergenzie sa dá vedá hodnotiť iba na zákl.
podmienkovosti - normovanie vl. hodností r \mathbb{C} (ak nie
veľkosť) hrá podstatnú úlohu.

—
"Ak konvergenca stagnuje, treba hľadať lepšie predpodmienkovanie".