

ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ



ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΒΟΛΗΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ
ΓΡΑΜΜΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ
ΓΙΑ ΤΟ ΜΕΠΤΥΧΙΑΚΟ ΔΙΠΛΩΜΑ ΕΙΔΙΚΕΥΣΗΣ
ΣΤΑ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ

ΑΝΤΩΝΕΛΛΟΥ ΘΕΟΔΟΣΙΑ

ΑΘΗΝΑ 2016

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Η παρούσα διπλωματική εργασία έχει σα θέμα τις μεθόδους προβολής για την αριθμητική επίλυση γραμμικών συστημάτων. Αρχικά θα αναφέρουμε κάποιους βασικούς ορισμούς της Γραμμικής Άλγεβρας και θα αναφέρουμε τον ορισμό της επαγώμενης νόρμας πίνακα και τις ιδιότητες της. Επίσης θα αναφερθούμε σε ορθογώνια διανύσματα και υποχώρους.

Στο δεύτερο κεφάλαιο θα αναλύσουμε κάποιες μεθόδους προβολής. Πιο συγκεκριμένα, θα αναφέρουμε βασικούς ορισμούς και αλγορίθμους μεθόδων προβολής. Στο τρίτο κεφάλαιο θα αναφερθούμε στη μέθοδο υποχώρων Krylov και ειδικότερα θα αναλύσουμε την μέθοδο Arnoldi και τον συμμετρικό Αλγόριθμο Lanczos.

Τέλος, παρουσιάζονται αριθμητικά παραδείγματα στα οποία χρησιμοποιούνται οι διάφορες μέθοδοι προβολής.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά την επιβλέπουσα Αναπλ. Καθηγήτρια του Μαθηματικού τμήματος του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών κα. Μαριλένα Μητρούλη για την καθοδήγηση, τη βοήθεια και την εμπιστοσύνη που μου έδειξε όλο αυτό το διάστημα εκπόνησης της παρούσας διπλωματικής εργασίας. Ακόμα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κ. Β. Δουγαλή και τον κ. Μ. Δρακόπουλο για τις γνώσεις που μου προσέφεραν καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου καθώς επίσης και την οικογένειά μου για την αμέριστη συμπαράσταση που μου έδειξε και σε αυτή την περίοδο της ζωής μου.

Αντωνέλλου Θεοδοσία

Αθήνα

Μάρτιος 2016

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ

1.1	ΒΑΣΙΚΟΙ ΟΡΙΣΜΟΙ.....	4
1.1.1	ΕΥΚΛΕΙΔΕΙΟΙ ΧΩΡΟΙ.....	4
1.1.2	ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ- ΙΔΙΟΔΙΑΝΥΣΜΑΤΑ- ΦΑΣΜΑΤΙΚΗ ΑΚΤΙΝΑ.....	5
1.2	ΝΟΡΜΕΣ ΠΙΝΑΚΩΝ.....	6
1.3	ΥΠΟΧΩΡΟΙ, ΕΥΡΟΣ, ΠΥΡΗΝΑΣ.....	8
1.4	ΟΡΘΟΓΩΝΙΑ ΔΙΑΝΥΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΥΠΟΧΩΡΟΙ.....	10

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΒΟΛΗΣ

2.1	ΒΑΣΙΚΟΙ ΟΡΙΣΜΟΙ ΚΑΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ.....	15
2.1.1	ΓΕΝΙΚΟΙ ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΒΟΛΗΣ	16
2.1.2	ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΗ ΠΙΝΑΚΑ.....	18
2.2	ΓΕΝΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ	
2.2.1	ΔΥΟ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ	21
2.2.2	ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΜΕ ΒΑΣΗ ΤΟΥΣ ΠΙΝΑΚΕΣ ΠΡΟΒΟΛΗΣ.....	22
2.2.3	ΓΕΝΙΚΟ ΟΡΙΟ ΣΦΑΛΜΑΤΟΣ.....	26

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΜΕΘΟΔΟΙ ΥΠΟΧΩΡΩΝ KRYLOV

3.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	31
3.2	ΥΠΟΧΩΡΟΙ KRYLOV.....	33
3.3	ΜΕΘΟΔΟΣ ARNOLDI.....	36
3.3.1	Ο ΒΑΣΙΚΟΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ	36
3.4	ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ 3.1.....	42

3.5 Ο ΣΥΜΜΕΤΡΙΚΟΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ LANCZOS.....	49
3.5.1 Ο ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ LANCZOS.....	49
3.5.2 ΣΧΕΣΗ ΜΕ ΤΑ ΟΡΘΟΓΩΝΙΑ ΠΟΛΥΩΝΥΜΑ.....	54
3.6 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ.....	55

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ

Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναφέρουμε κάποια βασικά μαθηματικά εργαλεία που θα μας χρειαστούν στην πορεία της παρούσης διπλωματικής εργασίας. Πιο συγκεκριμένα θα αναφερθούμε στις βασικές ιδιότητες νόρμας πίνακα και σε βασικούς ορισμούς όπως συμμετρικός θετικά ορισμένος πίνακας και θα αναφερθούμε και στα ορθογώνια διανύσματα και υποχώρους. [1], [4], [5].

1.1 Βασικοί Ορισμοί

1.1.1 Ευκλείδειοι χώροι

Ο ευκλείδειος χώρος διάστασης n είναι ένας γραμμικός χώρος με n πραγματικά στοιχεία διανύσματα – στήλες εφοδιασμένος με το εσωτερικό γινόμενο (x, y) των δύο διανυσμάτων $x = (x_i)$ και $y = (y_i)$ που δίνεται από τον τύπο:

$$(x, y) = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

Ο μοναδιαίος χώρος διάστασης n είναι ένας γραμμικός χώρος με n μιγαδικά στοιχεία διανύσματα-στήλες εφοδιασμένος με το εσωτερικό γινόμενο (x, y) των δύο διανυσμάτων $x = (x_i)$ και $y = (y_i)$ που δίνεται από τον τύπο:

$$(x, y) = \sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i$$

Όπου με $\bar{y}_i$ συμβολίζουμε το μιγαδικό συζυγή του μιγαδικού αριθμού y_i .

Σέ όσα ακολουθούν, θα συμβολίζουμε με X_n έναν μοναδιαίο ή έναν ευκλείδειο χώρο.

Ορισμός (Εσωτερικό γινόμενο)

Μία απεικόνιση $(\cdot, \cdot): X_n \times X_n \rightarrow \mathbb{R}$ με τις ακόλουθες ιδιότητες:

1. $(x, x) \geq 0$ για κάθε $x \in X_n$ και αν $(x, x) = 0 \Rightarrow x = 0$
2. $(x, y) = (\overline{y}, \overline{x})$ για κάθε $x, y \in X_n$
3. $(\lambda x + \mu y, z) = \lambda(x, z) + \mu(y, z)$ για $x, y, z \in X_n$ και λ, μ μιγαδικούς αριθμούς λέγεται εσωτερικό γινόμενο.

Ορισμός Θετικά Ορισμένου Πίνακα

Η τετραγωνική μορφή $x^T A x$ θα ονομάζεται θετικά ορισμένη εάν $x^T A x > 0$ για κάθε $x \neq 0$ και ο συμμετρικός πίνακας A θα ονομάζεται θετικά ορισμένος πίνακας εάν $x^T A x$ είναι θετικά ορισμένη τετραγωνική μορφή.

Θεώρημα

Ενας συμμετρικός πίνακας A θα είναι θετικά ορισμένος εάν όλες οι ιδιότητές του είναι θετικές.

1.1.2 Ιδιοτιμές- Ιδιοδιανύσματα- Φασματική ακτίνα

Είναι γνωστό ότι για κάθε $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ υπάρχουν $\lambda_i \in \mathbb{C}$ και $x^i \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$, $i = 1(1)n$, τ.ω. $Ax^i = \lambda_i x^i$.

Οι αριθμοί λ_i καλούνται ιδιοτιμές και τα x^i (αντίστοιχα) ιδιοδιανύσματα του πίνακα A . Οι ιδιοτιμές βρίσκονται από την επίλυση της εξίσωσης $\det(A - \lambda I) = 0$ ενώ τα αντίστοιχα n ιδιοδιανύσματα από την επίλυση των n γραμμικών συστημάτων $(A - \lambda_i I)x^i = 0$, $i = 1(1)n$. (Σημείωση: Υπενθυμίζεται ότι τα n γραμμικά συστήματα έχουν πίνακες συντελεστών αγνώστων μη αντιστρέψιμους και ότι οι λύσεις που αναζητούνται είναι μή μηδενικές. Ακόμη, αν x είναι ένα ιδιοδιάνυσμα του A τότε και το cx , όπου $c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, είναι επίσης ιδιοδιάνυσμα που δε θεωρείται όμως διαφορετικό από το x . Επίσης, είναι δυνατόν τα n ιδιοδιανύσματα να είναι γραμμικά ανεξάρτητα,

οπότε αποτελούν και μια βάση του $\mathbb{C}^n$ ή ο A να μην έχει γραμμικά ανεξάρτητα ιδιοδιανύσματα).

Θα συμβολίζουμε με

$$\sigma(A) := \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\} \text{ το φάσμα των ιδιοτιμών του } A$$

και με

$$\rho(A) := \max_{i=1(1)n} |\lambda_i| \text{ τη φασματική ακτίνα του } A.$$

1.2 Νόρμες Πινάκων

Για έναν γενικό πίνακα A στον $\mathbb{C}^{n \times m}$, ορίζουμε το παρακάτω ειδικό σύνολο νορμών

$$\|A\|_{pq} = \max_{x \in \mathbb{C}^m, x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_q}. \quad (1.1)$$

Η νόρμα $\|\cdot\|_{pq}$ επάγεται από τις δύο νόρμες $\|\cdot\|_p$ και $\|\cdot\|_q$. Οι νόρμες αυτές πληρούν τις συνήθεις ιδιότητες των νορμών,

δηλαδή,

$$\begin{aligned} \|A\| &\geq 0, \quad \forall A \in \mathbb{C}^{n \times m}, \quad \text{and} \quad \|A\| = 0 \text{ iff } A = 0 \\ \|\alpha A\| &= |\alpha| \|A\|, \quad \forall A \in \mathbb{C}^{n \times m}, \quad \forall \alpha \in \mathbb{C} \\ \|A + B\| &\leq \|A\| + \|B\|, \quad \forall A, B \in \mathbb{C}^{n \times m}. \end{aligned} \quad (1.2-1.4)$$

Μία νόρμα, η οποία πληροί τις παραπάνω ιδιότητες, δεν είναι τίποτε άλλο από μία *διανυσματική νόρμα*, η οποία εφαρμόζεται στον πίνακα ο οποίος θεωρείται ως διάνυσμα αποτελούμενο από m στήλες, οι οποίες συγκεντρώνονται σε ένα διάνυσμα μεγέθους nm .

Οι σημαντικότερες περιπτώσεις είναι πάλι εκείνες που σχετίζονται με $p, q = 1, 2, \infty$. Η περίπτωση $q = p$ είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα, και η σχετική νόρμα

$\|\cdot\|_{pq}$ συμβολίζεται απλά με $\|\cdot\|_p$ και ονομάζεται «p-νόρμα». Μία βασική ιδιότητα μίας p-νόρμας είναι ότι

$$\|AB\|_p \leq \|A\|_p \|B\|_p,$$

η οποία αποτελεί άμεση συνέπεια του ορισμού. Οι νόρμες πινάκων, οι οποίες πληρούν την παραπάνω ιδιότητα ορισμένες φορές ονομάζονται *σταθερές*. Συχνά, μία νόρμα, η οποία πληροί τις ιδιότητες (1.2-1.4), και η οποία είναι σταθερή, ονομάζεται *νόρμα πίνακα*. Ένα αποτέλεσμα της σταθερότητας είναι ότι για οποιονδήποτε τετράγωνο πίνακα A.

$$\|A^k\|_p \leq \|A\|_p^k.$$

Ειδικότερα, ο πίνακας A^k συγκλίνει προς το μηδέν, αν *οποιαδήποτε* από τις p-νόρμες αυτού του πίνακα είναι μικρότερη του 1.

Η νόρμα Frobenius ενός πίνακα ορίζεται από

$$\|A\|_F = \left(\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n |a_{ij}|^2 \right)^{1/2}. \quad (1.5)$$

Αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως η νόρμα-2 της διανυσματικής στήλης (ή γραμμής) στον $\mathbb{C}^{n^2}$, η οποία αποτελείται από όλες τις στήλες (ή γραμμές αντίστοιχα) του A, οι οποίες παρατίθενται από 1 ως m (ή από 1 ως n αντίστοιχα). Μπορεί ναδειχθεί ότι αυτή η νόρμα είναι επίσης σταθερή, παρά το γεγονός ότι δεν επάγεται από ένα ζεύγος διανυσματικών νορμών. Όμως, δεν πληροί ορισμένες από τις άλλες ιδιότητες των p-νορμών. Για παράδειγμα, η νόρμα Frobenius του μοναδιαίου πίνακα δεν ισούται με τη μονάδα. Προς αποφυγή αυτών των δυσκολιών, *θα χρησιμοποιήσουμε τον όρο νόρμα πίνακα μόνο για μία νόρμα, η οποία επάγεται από δύο νόρμες, όπως στον ορισμό (1.1)*. Έτσι, δεν θα θεωρήσουμε τη νόρμα Frobenius ως κανονική νόρμα πίνακα, με βάση τις συνθήκες μας, παρ' ότι είναι σταθερή.

Οι παρακάτω ισότητες, οι οποίες ικανοποιούνται από τις νόρμες πίνακα που ορίστηκαν παραπάνω, οδηγούν σε εναλλακτικούς ορισμούς, με τους οποίους είναι συχνά ευκολότερο να εργαστούμε:

$$\begin{aligned}\|A\|_1 &= \max_{j=1,\dots,m} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|, \\ \|A\|_\infty &= \max_{i=1,\dots,n} \sum_{j=1}^m |a_{ij}|, \\ \|A\|_2 &= [\rho(A^H A)]^{1/2} = [\rho(AA^H)]^{1/2}, \\ \|A\|_F &= [\text{tr}(A^H A)]^{1/2} = [\text{tr}(AA^H)]^{1/2}.\end{aligned}\quad (1.6-1.9)$$

Ορισμός 1. Έστω A ένας συμμετρικός θετικά ορισμένος πίνακας. Η A - νόρμα ενός διανύσματος x ορίζεται ως:

$$\|x\|_A = (Ax, x)^{\frac{1}{2}}$$

Όπως θα δειχθεί αργότερα, οι ιδιοτιμές των $A^H A$ είναι μη αρνητικές. Οι τετραγωνικές ρίζες τους ονομάζονται *μοναδιαίες τιμές* του A , και συμβολίζονται με $\sigma_i, i = 1, \dots, m$. Έτσι, η σχέση (1.8) δηλώνει ότι ο $\|A\|_2$ είναι ίσος με σ_1 , τη μεγαλύτερη μοναδιαία τιμή του A .

Παράδειγμα 1.1. Από τη σχέση (1.8), είναι φανερό ότι η φασματική ακτίνα $\rho(A)$ ισούται με τη νόρμα-2 ενός πίνακα, όταν ο πίνακας είναι Ερμιτιανός. Όμως, γενικά δεν αποτελεί νόρμα πίνακα. Για παράδειγμα, η πρώτη ιδιότητα των νορμών δεν ικανοποιείται, αφού για

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

έχουμε $\rho(A) = 0$, ενώ $A \neq 0$. Επίσης, η τριγωνική ανισότητα δεν ικανοποιείται για το ζεύγος A , και $B = A^T$ όπου ο A ορίζεται παραπάνω, Πράγματι,

$$\rho(A + B) = 1, \quad \rho(A) + \rho(B) = 0.$$

1.3 Υποχώροι, Εύρος, και Πυρήνας

Ένας υποχώρος $\mathcal{C}^n$ είναι ένα υποσύνολο του $\mathcal{C}^n$, το οποίο είναι επίσης ένας μιγαδικός διανυσματικός χώρος. Το σύνολο όλων των γραμμικών συνδυασμών ενός συνόλου διανυσμάτων $G = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_q\}$ του $\mathcal{C}^n$ είναι ένας διανυσματικός υποχώρος, ο οποίος ονομάζεται γραμμική θήκη του G ,

$$\begin{aligned}\text{span}\{G\} &= \text{span}\{a_1, a_2, \dots, a_q\} \\ &= \left\{ z \in \mathbb{C}^n \mid z = \sum_{i=1}^q \alpha_i a_i; \{\alpha_i\}_{i=1, \dots, q} \in \mathbb{C}^q \right\}.\end{aligned}\tag{1.10}$$

αν τα a_i είναι γραμμικά ανεξάρτητα, τότε κάθε διάστημα του περιβλήματος του $\{G\}$ επιδέχεται μία μοναδική έκφραση ως γραμμικό συνδυασμό των a_i . Το σύνολο G ονομάζεται βάση του υποχώρου του περιβλήματος $\{G\}$.

Δοθέντων δύο διανυσματικών υποχώρων S_1 και S_2 , το άθροισμά τους S είναι ένας υποχώρος που ορίζεται ως το σύνολο όλων των διανυσμάτων, το οποίο ισούται με το άθροισμα ενός διανύσματος S_1 και ενός διανύσματος S_2 . Η τομή των δύο υποχώρων είναι επίσης ένας υποχώρος. Αν η τομή των S_1 και S_2 αναχθεί σε $\{0\}$, τότε ως άθροισμα των S_1 και S_2 ονομάζεται το ευθύ άθροισμά τους, και συμβολίζεται με $S = S_1 \oplus S_2$. Όταν ο S ισούται με $\mathcal{C}^n$, τότε κάθε διάνυσμα x του $\mathcal{C}^n$ μπορεί να γραφεί με μοναδικό τρόπο ως άθροισμα ενός στοιχείου x_1 του S_1 και ενός στοιχείου x_2 του S_2 . Ο μετασχηματισμός P , ο οποίος συνδέει το x με το x_1 είναι ένας γραμμικός μετασχηματισμός, ο οποίος είναι *ταυτοδύναμος*, δηλαδή, τέτοιος ώστε $P^2 = P$. Ονομάζεται *τελεστής προβολής* επί του S_1 κατά μήκος του S_2 .

Δύο σημαντικοί υποχώροι, οι οποίοι σχετίζονται με έναν πίνακα A του $\mathbb{C}^{n \times m}$ είναι το *εύρος* του, το οποίο ορίζεται από

$$\text{Ran}(A) = \{Ax \mid x \in \mathbb{C}^m\}, \quad (1.11)$$

και ο *πυρήνας* του ή *μηδενοχώρος*

$$\text{Null}(A) = \{x \in \mathbb{C}^m \mid Ax = 0\}.$$

Το εύρος του A είναι φανερό ότι ισούται με το γραμμικό *περίβλημα* των στηλών του. Η *τάξη* του πίνακα ισούται με τη διάσταση του εύρους του A , δηλαδή τον αριθμό των γραμμικά εξαρτώμενων στηλών. Αυτή η *τάξη στήλης* ισούται με την *τάξη γραμμής*, τον αριθμό των γραμμικά εξαρτώμενων γραμμών του A . Ένας πίνακας $\mathbb{C}^{n \times m}$ είναι *πλήρους τάξης*, όταν η τάξη του ισούται με το μικρότερο εκ των m και n . Ένα βασικό αποτέλεσμα της γραμμικής άλγεβρας εκφράζεται από την παρακάτω σχέση

$$\mathbb{C}^n = \text{Ran}(A) \oplus \text{Null}(A^T).$$

Το ίδιο αποτέλεσμα, εφαρμοζόμενο στον ανάστροφό του A δίνει: $\mathbb{C}^m = \text{Ran}(A^T) \oplus \text{Null}(A)$.

Ένας υποχώρος S λέμε ότι είναι *αμετάβλητος* βάσει ενός (τετράγωνου) πίνακα A , οποτεδήποτε $AS \subset S$. Συγκεκριμένα, για κάθε ιδιοτιμή λ του A , ο υποχώρος $\text{Null}(A - \lambda I)$ ονομάζεται *ιδιοχώρος* σχετικός με το λ , και αποτελείται από όλα τα ιδιοδιανύσματα του A , τα οποία σχετίζονται με το λ , πλέον του μηδενικού διανύσματος.

1.4 Ορθογώνια Διανύσματα και Υποχώροι

Ένα σύνολο διανυσμάτων $G = \{a_1, a_2, \dots, a_r\}$ λέμε ότι είναι *ορθογώνιο* αν

$$(a_i, a_j) = 0 \quad \text{όταν} \quad i \neq j$$

Είναι *ορθοκανονικό* αν, επιπλέον, κάθε διάνυσμα του G έχει μία νόρμα-2 ίση με τη μονάδα. Ένα διάνυσμα, το οποίο είναι ορθογώνιο προς όλα τα διανύσματα ενός υποχώρου S λέμε ότι είναι ορθογώνιο προς αυτόν τον υποχώρο. Το σύνολο όλων των διανυσμάτων, τα οποία είναι ορθογώνια προς τον S είναι ένας διανυσματικός υποχώρος, ο οποίος ονομάζεται *ορθογώνιο συμπλήρωμα* του S , και συμβολίζεται με $S^\perp$. Ο χώρος C^n είναι το ευθύ άθροισμα του S και το ορθογώνιου συμπληρώματός του. Έτσι, κάθε διάνυσμα x μπορεί να γραφεί με μοναδικό τρόπο, ως άθροισμα ενός διανύσματος στον S και ενός διανύσματος στον $S^\perp$. Ο τελεστής, ο οποίος συνδέει το x με το στοιχείο του στον υποχώρο S είναι ο *ορθογώνιος τελεστής προβολής* επί του S .

Κάθε υποχώρος επιδέχεται μία ορθοκανονική βάση, η οποία λαμβάνεται μέσω της λήψης οποιασδήποτε βάσης και «ορθοκανονικοποίησής» της. Η ορθοκανονικοποίηση μπορεί να επιτευχθεί μέσω ενός αλγόριθμου, γνωστού ως διαδικασία Gram-Schmidt, την οποία θα περιγράψουμε τώρα.

Δοθέντος ενός συνόλου γραμμικά ανεξάρτητων διανυσμάτων $\{x_1, x_2, \dots, x_r\}$, πραγματοποιούμε πρώτα κανονικοποίηση του διανύσματος x_1 , το οποίο σημαίνει τη διαίρεσή του με τη νόρμα-2 του, ώστε να ληφθεί το κλιμακωτό διάνυσμα q_1 της μοναδιαίας νόρμας.

Στη συνέχεια, πραγματοποιείται ορθογωνοποίηση του έναντι του διανύσματος q_1 αφαιρώντας από το x_2 ένα πολλαπλάσιο του q_1 για να γίνει το προκύπτον διάνυσμα ορθογώνιο προς το q_1 , δηλαδή,

$$x_2 \leftarrow x_2 - (x_2, q_1)q_1.$$

Το προκύπτον διάνυσμα στη συνέχεια υφίσταται κανονικοποίηση για να δώσει το δεύτερο διάνυσμα q_2 . Το i -οστό βήμα της διαδικασίας Gram-Schmidt αποτελείται από την ορθογωνοποίηση του διανύσματος x_i έναντι όλων των προηγούμενων διανυσμάτων q_i .

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 1.1 Gram-Schmidt

```

Compute  $r_{11} := \|x_1\|_2$ . If  $r_{11} = 0$  Stop, else compute  $q_1 := x_1/r_{11}$ .
For  $j = 2, \dots, r$  Do:
    Compute  $r_{ij} := (x_j, q_i)$  , for  $i = 1, 2, \dots, j-1$ 
     $\hat{q} := x_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij}q_i$ 
     $r_{jj} := \|\hat{q}\|_2$  ,
    If  $r_{jj} = 0$  then Stop, else  $q_j := \hat{q}/r_{jj}$ 
EndDo

```

Είναι εύκολο να αποδείξουμε ότι ο παραπάνω αλγόριθμός δεν θα διασπαστεί, δηλαδή θα ολοκληρωθούν και τα r βήματα, αν και μόνο αν, το σύνολο διανυσμάτων $x_1, x_2, \dots, x_r$ είναι γραμμικό εξαρτώμενο. Από τις γραμμές 4 και 5, είναι φανερό ότι σε κάθε βήμα του αλγόριθμου ισχύει η παρακάτω σχέση:

$$x_j = \sum_{i=1}^j r_{ij}q_i.$$

Αν $X = [x_1, x_2, \dots, x_r]$, $Q = [q_1, q_2, \dots, q_r]$, και αν με R συμβολίζεται ο $r \times r$ άνω τριγωνικός πίνακας, τα μη μηδενικά στοιχεία του οποίου είναι τα r_{ij} τα οποία ορίζονται στον αλγόριθμο, τότε η παραπάνω σχέση μπορεί να γραφεί ως

$$X=QR \tag{1.12}$$

Αυτή η σχέση ονομάζεται παραγοντοποίηση QR ενός $n \times r$ πίνακα X . Από αυτά που αναφέρθηκαν παραπάνω η παραγοντοποίηση QR ενός πίνακα

υφίσταται οποτεδήποτε οι διανυσματικές στήλες του X σχηματίζουν ένα γραμμικά ανεξάρτητο σύνολο διανυσμάτων.

Ο παραπάνω αλγόριθμος είναι μία πρότυπη διαδικασία Gram-Schmidt. Υπάρχουν εναλλακτικές διατυπώσεις του αλγόριθμου, οι οποίες διαθέτουν καλύτερες αριθμητικές ιδιότητες. Οι πιο γνωστές από αυτές είναι ο Τροποποιημένος Αλγόριθμος Gram-Schmidt (MGS).

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 1.2 Τροποποιημένος Gram-Schmidt

```

Define  $r_{11} := \|x_1\|_2$ . If  $r_{11} = 0$  Stop, else  $q_1 := x_1/r_{11}$ .
For  $j = 2, \dots, r$  Do:
    Define  $\hat{q} := x_j$ 
    For  $i = 1, \dots, j - 1$ , Do:
         $r_{ij} := (\hat{q}, q_i)$ 
         $\hat{q} := \hat{q} - r_{ij}q_i$ 
    EndDo
    Compute  $r_{jj} := \|\hat{q}\|_2$ ,
    If  $r_{jj} = 0$  then Stop, else  $q_j := \hat{q}/r_{jj}$ 
EndDo

```

Παράδειγμα

Να ορθοκανονικοποιηθούν τα διανύσματα:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Λύση:

C.G.S.:

$$\text{B.1: } q_1 = \frac{v_1}{\|v_1\|} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$\text{B.2: } \dot{v}_2 = v_2 - (q_1^T v_2) q_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ -1/2 \end{pmatrix}.$$

$$q_1^T v_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$q_2 = \frac{\dot{v}_2}{\|\dot{v}_2\|} = \sqrt{2} \cdot \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ -1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ 0 \\ -\sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$$

$$\text{B.3: } \dot{v}_3 = v_3 - (q_1^T v_3) q_1 - (q_2^T v_3) q_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} =$$

$$q_3 \cdot q_1^T v_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2} \quad // \cdot q_2^T v_3 =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2}$$

M.G.S :

$$\text{B.1: } q_1 = \frac{v_1}{\|v_1\|} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot v_2^{(1)} = v_2 - (q_1^T v_2) q_1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 0 \\ -1/2 \end{pmatrix} \cdot v_3^{(1)} = v_3 -$$

$$(q_1^T v_3) q_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \sqrt{2} \cdot \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{B.2: } q_2 = \frac{v_2^{(1)}}{\|v_2^{(1)}\|} = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ 0 \\ -\sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$$

Κεφάλαιο 2

ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΡΟΒΟΛΗΣ

Οι περισσότερες από τις υφιστάμενες επαναληπτικές μεθόδους προβολής για την επίλυση μεγάλων γραμμικών συστημάτων εξισώσεων χρησιμοποιούν κατά κάποιον τρόπο μία διαδικασία προβολής. Αυτή η διαδικασία προβολής αναπαριστά έναν κανονικό τρόπο εξαγωγής προσεγγιστικής λύσης ενός γραμμικού συστήματος από έναν υποχώρο. Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφονται αυτές οι τεχνικές εντός ενός πολύ γενικού πλαισίου και παρουσιάζεται κάποιο μέρος της θεωρίας. Η μονοδιάστατη περίπτωση καλύπτεται αναλυτικά στο τέλος του κεφαλαίου, καθώς παρέχει μία καλή προεπισκόπηση πιο πολύπλοκων διαδικασιών προβολής [4].

2.1 Βασικοί Ορισμοί και Αλγόριθμοι

Θεωρούμε το γραμμικό σύστημα

$$Ax = b, \tag{2.1}$$

όπου ο A είναι πραγματικός πίνακας $n \times n$.

Η ιδέα των *τεχνικών προβολής* είναι η εξαγωγή μίας προσεγγιστικής λύσης στο παραπάνω πρόβλημα, από έναν υποχώρο του R^n . Αν $\mathcal{K}$ είναι ο εν λόγω υποχώρος των υποψήφιων *προσεγγιστικών λύσεων*, ή *υποχώρος αναζήτησης*, και m η διάστασή του, τότε, γενικά, θα πρέπει να θέσουμε m περιορισμούς, ώστε να μπορέσουμε να εξάγουμε αυτήν την προσέγγιση. Ένας συνήθης τρόπος περιγραφής αυτών των περιορισμών είναι να θέσουμε m (ανεξάρτητες) συνθήκες ορθογωνιότητας. Συγκεκριμένα, το διάνυσμα υπολοίπου $b - Ax$ περιορίζεται να είναι ορθογώνιο προς m γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα. Αυτό το απλό πλαίσιο αναφοράς είναι κοινό σε πολλές διαφορετικές μαθηματικές μεθόδους, και είναι γνωστό ως συνθήκες Petron-Galerkin.

Υπάρχουν δύο ευρείες κατηγορίες μεθόδων προβολής: οι *ορθογώνιες* και οι *πλάγιες*. Στην τεχνική ορθογωνίας προβολής, ο υποχώρος $\mathcal{L}$ είναι ο ίδιος με τον $\mathcal{K}$. Σε μία μέθοδο πλάγιας προβολής, ο $\mathcal{L}$ είναι διαφορετικός από τον $\mathcal{K}$, και μπορεί να τελείως άσχετος προς αυτόν. Αυτή η διάκριση είναι μάλλον σημαντική, και εγείρει τη δημιουργία διαφορετικών τύπων αλγόριθμων.

2.1.1 Γενικοί Μέθοδοι Προβολής

Έστω A ένας πραγματικός πίνακας $n \times n$ και $\mathcal{K}$ και $\mathcal{L}$ δύο m -διάστατοι υποχώροι του R^n . Μία τεχνική προβολής επί του υποχώρου $\mathcal{K}$ και ορθογώνια ως προς τον $\mathcal{L}$ είναι μία διαδικασία, κατά την οποία βρίσκεται μία προσεγγιστική λύση $\tilde{x}$ στην (2.1) θέτοντας τις συνθήκες, το $\tilde{x}$ να ανήκει στον $\mathcal{K}$ και το νέο διάνυσμα υπολοίπου να είναι ορθογώνιο στον $\mathcal{L}$,

$$\text{θέλουμε } \tilde{x} \in \mathcal{K}, \quad \text{τέτοιο ώστε } b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L} \quad (2.2)$$

Εάν θελήσουμε να εκμεταλλευτούμε τη γνώση μίας αρχικής υπόθεσης x_0 για τη λύση, τότε η προσέγγιση θα πρέπει να αναζητηθεί στον ίδιο συσχετισμένο χώρο $x_0 + \mathcal{K}$. Αυτό απαιτεί μία ελαφρά τροποποίηση του παραπάνω τύπου. Το προσεγγιστικό πρόβλημα θα πρέπει να επανακαθοριστεί ως

$$\tilde{x} \in x_0 + \mathcal{K}, \quad \text{τέτοιο} \quad \text{ώστε} \quad b - A\tilde{x} \perp \mathcal{L} \quad (2.3)$$

Παρατηρούμε ότι αν το $\tilde{x}$ γραφεί με το μορφή $\tilde{x} = x_0 + \delta$, και το αρχικό διάνυσμα υπολοίπου r_0 ορίζεται ως

$$r_0 = b - Ax_0, \quad (2.4)$$

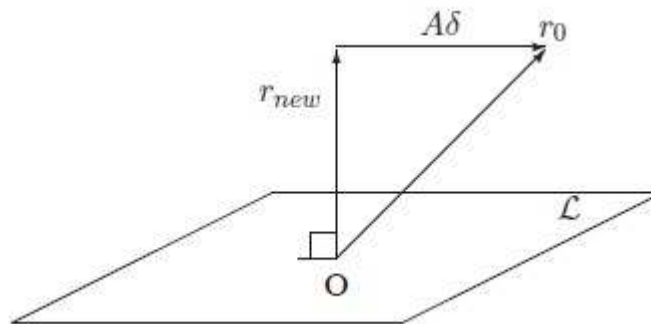
τότε η παραπάνω εξίσωση γίνεται $b - A(x_0 + \delta) \perp \mathcal{L}$ ή

$$r_0 - A\delta \perp \mathcal{L}.$$

Με άλλα λόγια, η προσεγγιστική λύση μπορεί να οριστεί ως

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= x_0 + \delta, \quad \delta \in \mathcal{K}, \\ (r_0 - A\delta, w) &= 0, \quad \forall w \in \mathcal{L}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Η συνθήκη ορθογωνιότητας (2.5) που θέτουμε στο νέο υπόλοιπο $r_{new} = r_0 - A\delta$ απεικονίζεται στο Σχήμα 2.1.



Σχήμα 2.1: Ερμηνεία της συνθήκης ορθογωνιότητας.

Αυτό είναι βασικό βήμα προβολής, στη γενικότερη μορφή της. Οι περισσότερες συνήθειες τεχνικές χρησιμοποιούν μία διαδοχή αυτών των προβολών. Συνήθως, ένα βήμα προβολής χρησιμοποιεί ένα νέο ζεύγος υποχώρων $\mathcal{K}$ και $\mathcal{L}$ και μία αρχική υπόθεση x_0 , η οποία ισούται με την πιο πρόσφατη προσέγγιση, την οποία λαμβάνουμε από το προηγούμενο βήμα προβολής. Οι μέθοδοι προβολής αποτελούν ένα ενοποιητικό πλαίσιο

αναφοράς πολλών από τις γνωστότερες μεθόδους επιστημονικού υπολογισμού. Όποτε μία προσέγγιση ορίζεται μέσω m βαθμών ελευθερίας (υποχώρος $\mathcal{K}$) και m περιορισμών (υποχώρος $\mathcal{L}$), προκύπτει μία διαδικασία προβολής.

Οι μέθοδοι ορθογώνιας προβολής αντιστοιχούν στην ειδική περίπτωση κατά την οποία οι δύο υποχώροι $\mathcal{L}$ και $\mathcal{K}$ είναι ταυτόσημοι. Η διάκριση είναι ιδιαίτερα σημαντική στην Ερμιτιανή περίπτωση, καθώς μας εγγυάται ότι το πρόβλημα προβολής θα είναι Ερμιτιανό, σε αυτήν την περίπτωση, όπως θα δούμε σε λίγο. Επιπρόσθετα, ορισμένα χρήσιμα θεωρητικά αποτελέσματα είναι αληθή για την ορθογώνια περίπτωση. Όταν $\mathcal{L} = \mathcal{K}$, οι συνθήκες Petrov-Galerkin συχνά ονομάζονται συνθήκες Galerkin [4].

2.1.2 Αναπαράσταση Πίνακα

Έστω $V = [v_1, \dots, v_m]$, ένας $n \times m$ πίνακας, οι διανυσματικές στήλες του οποίου αποτελούν τη βάση του $\mathcal{K}$, και, ομοίως, $W = [w_1, \dots, w_m]$, ένας πίνακας $n \times m$ οι διανυσματικές στήλες του οποίου αποτελούν τη βάση του $\mathcal{L}$. Αν η προσεγγιστική λύση γράφεται ως

$$\tilde{x} = x_0 + Vy,$$

τότε η συνθήκη ορθογωνιότητας οδηγεί άμεσα στο παρακάτω σύστημα εξισώσεων για το διάνυσμα y :

$$W^T AVy = W^T r_0.$$

Αν υποθέσουμε ότι ο $n \times m$ πίνακας $W^T AV$ είναι μη ιδιάζων, προκύπτει η παρακάτω έκφραση της προσεγγιστικής λύσης $\tilde{x}$,

$$\tilde{x} = x_0 + V(W^T AV)^{-1}W^T r_0.$$

Σε πολλούς αλγόριθμους, δεν χρειάζεται να σχηματίσουμε τον πίνακα $W^T AV$ αφού είναι διαθέσιμος ως υποπροϊόν του αλγόριθμου. Ο παρακάτω αλγόριθμος αναπαριστά μία πρωτότυπη τεχνική προβολής.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 2.1 Πρωτότυπη Μέθοδος Προβολής

1. *Until convergence, Do:*
2. *Select a pair of subspaces $\mathcal{K}$ and $\mathcal{L}$*
3. *Choose bases $V = [v_1, \dots, v_m]$ and $W = [w_1, \dots, w_m]$ for $\mathcal{K}$ and $\mathcal{L}$*
4. $r := b - Ax$
5. $y := (W^T AV)^{-1} W^T r$
6. $x := x + Vy$
7. *EndDo*

Παράδειγμα 1.2. Ως παράδειγμα, θεωρούμε τον πίνακα

$$A = \begin{pmatrix} O & I \\ I & I \end{pmatrix},$$

όπου I είναι ο $m \times m$ ταυτοτικός πίνακας και O είναι ο $m \times m$ μηδενικός πίνακας, και έστω $W = [e_1, e_2, \dots, e_m]$. Παρ' ότι ο A είναι μη ιδιάζων, ο πίνακας $W^T AV$ είναι ακριβώς το τετράγωνο O της άνω αριστερής γωνίας του A , και είναι συνεπώς ιδιάζων.

Μπορεί να επαληθευτεί εύκολα ότι ο πίνακας $W^T AV$ είναι μη ιδιάζων, αν και μόνο αν, κανένα διάνυσμα του υποχώρου $\mathcal{AK}$ δεν είναι ορθογώνιο ως προς τον υποχώρο $\mathcal{L}$. Υπάρχουν δύο σημαντικές ειδικές περιπτώσεις, όπου εξασφαλίζεται ότι ο $W^T AV$ είναι μη ιδιάζων. Αυτά αναλύονται στην παρακάτω πρόταση.

Πρόταση 2.1 Έστω ότι οι A , $\mathcal{L}$, και $\mathcal{K}$ ικανοποιούν μία από τις παρακάτω συνθήκες,

- i. Ο A είναι θετικά ορισμένος και $\mathcal{L} = \mathcal{K}$, ή
- ii. Ο A είναι μη ιδιάζων και $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$.

Τότε ο πίνακας $B = W^T A V$ είναι μη ιδιάζων για κάθε βάση V και W των $\mathcal{K}$ και $\mathcal{L}$, αντίστοιχα.

Απόδειξη. Θεωρούμε πρώτα την περίπτωση (i). Έστω V τυχαία βάση του $\mathcal{K}$ και W τυχαία βάση του $\mathcal{L}$. Πράγματι, αφού οι $\mathcal{L}$ και $\mathcal{K}$ ταυτίζονται, ο W μπορεί να πάντα να εκφραστεί ως $W = VG$, όπου G είναι $m \times m$ μη ιδιάζων πίνακας.

Τότε

$$B = W^T A V = G^T V^T A V.$$

Αφού ο A είναι θετικά ορισμένος, το ίδιο ισχύει και για τον $V^T A V$ και αυτό δείχνει ότι ο B είναι μη ιδιάζων.

Θεωρούμε τώρα την περίπτωση (ii). Έστω V τυχαία βάση του $\mathcal{K}$ και W τυχαία βάση του $\mathcal{L}$. Αφού $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$, ο W μπορεί να εκφραστεί σε αυτήν την περίπτωση ως $W = AVG$, όπου ο G είναι μη ιδιάζων πίνακας $m \times m$. Τότε

$$B = W^T A V = G^T (AV)^T A V. \quad (2.6)$$

Αφού ο A είναι μη μοναδιαίος, ο $n \times m$ πίνακας AV είναι πλήρους τάξης, και κατά συνέπεια, ο $(AV)^T A V$ είναι μη ιδιάζων. Αυτό, μαζί με την (2.6), δείχνει ότι ο B είναι μη ιδιάζων.

Θεωρούμε τώρα την ειδική περίπτωση όπου ο A είναι συμμετρικός (πραγματικός) και χρησιμοποιείται τεχνική ορθογώνιας προβολής. Σε αυτήν την περίπτωση, μπορεί να χρησιμοποιηθεί η ίδια βάση για τους $\mathcal{L}$ και $\mathcal{K}$, οι

οποίοι είναι ταυτόσημοι υποχώροι, και ο προβαλλόμενος πίνακας, ο οποίος είναι ο $B = V^T A V$, είναι συμμετρικός. Επιπρόσθετα, αν ο πίνακας A είναι Συμμετρικός Θετικά Ορισμένος, το ίδιο ισχύει και για τον B .

2.2 ΓΕΝΙΚΗ ΘΕΩΡΙΑ

Αυτή η ενότητα παρέχει ορισμένα γενικά θεωρητικά αποτελέσματα χωρίς να είναι αναφέρεται συγκεκριμένα στους υποχώρους $\mathcal{K}$ και $\mathcal{L}$, οι οποίοι χρησιμοποιούνται. Ο σκοπός είναι να μάθουμε για την ποιότητα της προσέγγισης που λαμβάνεται από μία γενική διαδικασία προβολής, και γι' αυτόν τον σκοπό χρησιμοποιούμε δύο κύρια εργαλεία.

Το πρώτο είναι η αξιοποίηση των ιδιοτήτων βελτιστοποίησης των πινάκων προβολής. Το δεύτερο εργαλείο αποτελείται από την ερμηνεία του προβλήματος προβολής με τη βοήθεια των τελεστών προβολής, σε μία απόπειρα εξαγωγής των ορίων υπολοίπου.

2.2.1 Δύο Αποτελέσματα Βελτιστοποίησης

Σε αυτήν την ενότητα, θα δειχθούν δύο σημαντικά αποτελέσματα βελτιστοποίησης, τα οποία ικανοποιούνται από τις προσεγγιστικές λύσεις σε ορισμένες περιπτώσεις. Θεωρούμε πρώτα την περίπτωση κατά οποία ο A είναι Συμμετρικός Θετικά Οριζόμενος (SPD)(Symmetric Positive Definite).

Πρόταση 2.2 Υποθέτουμε ότι ο A είναι Συμμετρικός Θετικά Οριζόμενος και $\mathcal{L} = \mathcal{K}$. Τότε το διάνυσμα $\tilde{x}$ είναι το αποτέλεσμα μίας μεθόδου (ορθογώνιας) προβολής επί του $\mathcal{K}$ με το αρχικό διάνυσμα x_0 , αν και μόνο αν, ελαχιστοποιεί τη νόρμα- A του σφάλματος επί του $x_0 + \mathcal{K}$, δηλαδή, αν και μόνο αν

$$E(\tilde{x}) = \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}} E(x),$$

όπου

$$E(x) \equiv (A(x_* - x), x_* - x)^{1/2}.$$

Απόδειξη. Για να ελαχιστοποιεί το $\tilde{x}$ το $E(x)$, είναι αναγκαία και ικανή συνθήκη το $x_* - \tilde{x}$ να είναι A -ορθογώνιο προς όλον τον υποχώρο $\mathcal{K}$. Αυτό δίνει

$$(A(x_* - \tilde{x}), v) = 0, \quad \forall v \in \mathcal{K},$$

ή, ισοδύναμα,

$$(b - A\tilde{x}, v) = 0, \quad \forall v \in \mathcal{K},$$

η οποία είναι η συνθήκη Galerkin τη διαδικασία ορθογώνιας προβολής της προσέγγισης $\tilde{x}$.

Παίρνουμε τώρα την περίπτωση όταν ο $\mathcal{L}$ ορίζεται από $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$.

Πρόταση 2.3 Έστω A ένας τυχαίος τετράγωνος πίνακας, και υποθέτουμε ότι $\mathcal{L} = A \mathcal{K}$. Τότε το διάνυσμα $\tilde{x}$ είναι το αποτέλεσμα της μεθόδου (πλάγιας) προβολής επί του $\mathcal{K}$ ορθογωνίως προς τον $\mathcal{L}$ με το διάνυσμα έναρξης x_0 , αν και μόνο αν ελαχιστοποιεί τη νόρμα-2 του διανύσματος υπολοίπου $b - Ax$ επί του $x \in x_0 + \mathcal{K}$, δηλαδή, αν και μόνο αν

$$R(\tilde{x}) = \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}} R(x),$$

όπου $R(\tilde{x}) \equiv \|b - A\tilde{x}\|_2$

Απόδειξη. Για να είναι το $\tilde{x}$ ελαχιστοποιητής του $R(x)$, είναι αναγκαία και ικανή συνθήκη το $b - A\tilde{x}$ να είναι ορθογώνιο προς όλα τα διανύσματα της μορφής $v = Ay$, όπου το y ανήκει στον $\mathcal{K}$, δηλαδή,

$$(b - A\tilde{x}, v) = 0, \quad \forall v \in A\mathcal{K},$$

ο οποίος είναι ακριβώς η συνθήκη Petrov-Galerkin που ορίζει την προσεγγιστική λύση $\tilde{x}$.

Αξίζει να σημειώσουμε ότι ο A δεν χρειάζεται να είναι μη ιδιάζων στην παραπάνω πρόταση. Όταν ο A είναι μοναδιαίος, μπορεί να υπάρχουν άπειρος αριθμός $\tilde{x}$ τα οποία ικανοποιούν τη συνθήκη βελτιστοποίησης.

2.2.2 Ερμηνεία με Βάση τους Πίνακες Προβολής

Θα επιστρέψουμε τώρα σε δύο σημαντικές ειδικές περιπτώσεις, οι οποίες διαχωρίστηκαν στην προηγούμενη ενότητα, δηλαδή, τις περιπτώσεις $\mathcal{L} = \mathcal{K}$ και $\mathcal{L} = A \mathcal{K}$. Σε αυτές τις περιπτώσεις, το αποτέλεσμα της διαδικασίας προβολής μπορεί να ερμηνευθεί εύκολα με βάση τις λειτουργίες των

ορθογωνίων πινάκων προβολής επί του αρχικού υπολοίπου ή σφάλματος. Θεωρούμε πρώτα τη δεύτερη περίπτωση, καθώς είναι κάπως πιο απλή.

Έστω $r_0 = b - Ax_0$, και $\tilde{r} = b - A\tilde{x}$ το υπόλοιπο που λαμβάνεται μετά τη διαδικασία προβολής με $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$.

Τότε,

$$\tilde{r} = b - A(x_0 + \delta) = r_0 - A\delta. \quad (2.7)$$

Επιπρόσθετα, το δ λαμβάνεται αν θέσουμε τη συνθήκη το $r_0 - A\delta$ να είναι ορθογώνιο προς το $A\mathcal{K}$. Συνεπώς, το διάνυσμα $A\delta$ είναι η ορθογώνια προβολή του διανύσματος r_0 επί του διανύσματος $A\mathcal{K}$. Αυτό απεικονίζεται στο Σχήμα 2.2. Κατά συνέπεια, μπορεί να διατυπωθεί η ακόλουθη πρόταση.

Πρόταση 2.4 Έστω $\tilde{x}$ η προσεγγιστική λύση που λαμβάνεται από τη διαδικασία προβολής επί του $\mathcal{K}$ ορθογωνίως προς τον $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$, και έστω $\tilde{r} = b - A\tilde{x}$ το σχετικό υπόλοιπο.

Τότε,

$$\tilde{r} = (I - P)r_0, \quad (2.8)$$

όπου ο P συμβολίζει τον ορθογώνιο πίνακα προβολής επί του υποχώρου $A\mathcal{K}$.

Ένα αποτέλεσμα αυτής της πρότασης είναι ότι η νόρμα-2 του διανύσματος υπολοίπου που λαμβάνεται μετά από ένα βήμα προβολής δεν θα υπερβαίνει την αρχική νόρμα-2 του υπολοίπου, δηλαδή,

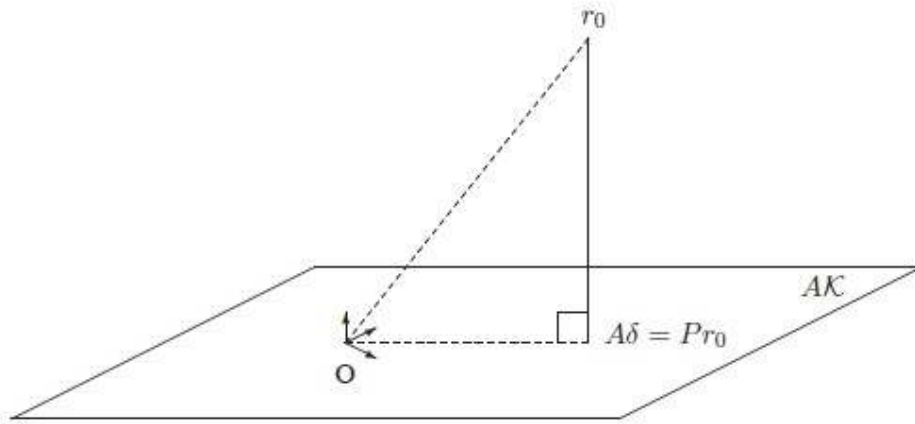
$$\|\tilde{r}\|_2 \leq \|r_0\|_2,$$

το αποτέλεσμα που έχουμε ήδη αποδείξει. Αυτή η κατηγορία μεθόδων μπορεί να ονομαστεί, μέθοδοι προβολής υπολοίπου.

Θεωρούμε τώρα την περίπτωση όπου $\mathcal{L} = \mathcal{K}$ και ο A είναι Συμμετρικός Θετικά Ορισμένος. Έστω $d_0 = x_* - x_0$ το αρχικό σφάλμα, όπου το x_* συμβολίζει την ακριβή λύση του συστήματος και, ομοίως, έστω $\tilde{d} = x_* - \tilde{x}$ όπου το $\tilde{x} = x_0 + \delta$ είναι η προσεγγιστική λύση που προκύπτει από το βήμα της προβολής.

Τότε η (2.6) δίνει τη σχέση

$$A\tilde{d} = \tilde{r} = A(d_0 - \delta),$$



Σχήμα 2.2: Ερμηνεία της διαδικασίας προβολής για την περίπτωση όπου $\mathcal{L} = A \mathcal{K}$.

όπου το δ λαμβάνεται με περιορισμό το διάνυσμα υπολοίπου $r_0 - A\delta$ να είναι ορθογώνιο προς τον $\mathcal{K}$:

$$(r_0 - A\delta, w) = 0, \quad \forall w \in \mathcal{K}.$$

Η παραπάνω συνθήκη είναι ισοδύναμη με

$$(A(d_0 - \delta), w) = 0, \quad \forall w \in \mathcal{K}.$$

Αφού ο A είναι Συμμετρικός Θετικά Ορισμένος, ορίζει το εσωτερικό γινόμενο το οποίο συνήθως συμβολίζεται με $(\cdot, \cdot)_A$ οπότε η παραπάνω συνθήκη γίνεται

$$(d_0 - \delta, w)_A = 0, \quad \forall w \in \mathcal{K}.$$

Τώρα είναι εύκολο να ερμηνεύσουμε την παραπάνω συνθήκη: Το διάνυσμα δ είναι η A -ορθογώνια προβολή του αρχικού σφάλματος d_0 επί του υποχώρου $\mathcal{K}$.

Πρόταση 2.5 Έστω $\tilde{x}$ η προσεγγιστική λύση που λαμβάνεται από τη διαδικασία ορθογώνιας προβολής επί του $\mathcal{K}$, έστω ότι $\tilde{d} = x_* - \tilde{x}$ είναι το σχετικό διανυσματικό σφάλμα. Τότε,

$$\tilde{d} = (I - P_A)d_0,$$

όπου ο P_A συμβολίζει τον πίνακα προβολής επί του υποχώρου $\mathcal{K}$, ο οποίος είναι ορθογώνιος ως προς το εσωτερικό γινόμενο του A .

Αποτέλεσμα της πρότασης είναι η A -νόρμα του σφάλματος που λαμβάνεται μετά από ένα βήμα προβολής δεν υπερβαίνει την αρχική νόρμα- A του σφάλματος, δηλαδή,

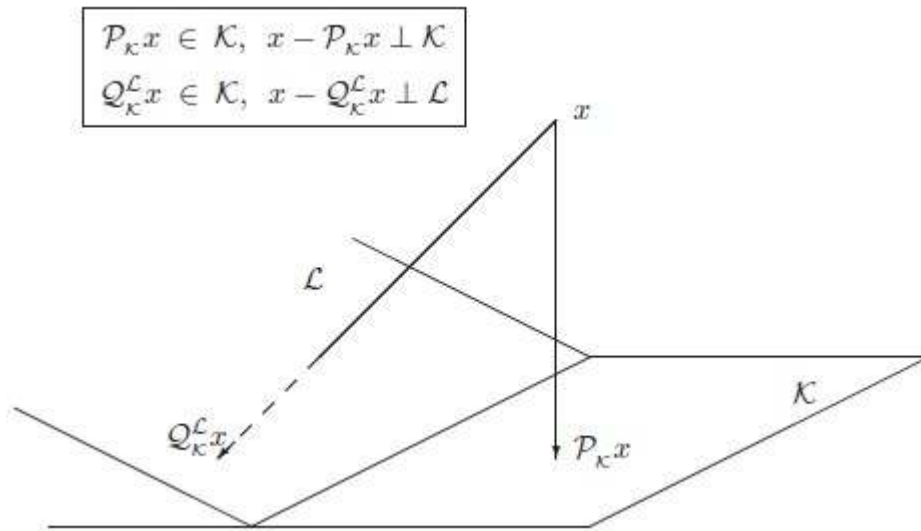
$$\|\tilde{d}\|_A \leq \|d_0\|_A,$$

το οποίο είναι αναμενόμενο, διότι είναι γνωστό ότι η νόρμα- A του σφάλματος ελαχιστοποιείται στο $x_0 + \mathcal{K}$.

2.2.3 Γενικό Όριο Σφάλματος

Αν κανένα διάνυσμα του υποχώρου $\mathcal{K}$ δεν προσεγγίζει την ακριβή λύση x , τότε είναι αδύνατον να βρούμε μία ικανοποιητική προσέγγιση $\tilde{x}$ του x από

τον $\mathcal{K}$. Συνεπώς, η προσέγγιση που λαμβάνεται από κάθε διαδικασία προβολής με βάση τον $\mathcal{K}$ δεν θα είναι ικανοποιητική. Αφ' ετέρου, εάν υπάρχει κάποιο διάνυσμα στον $\mathcal{K}$, το οποίο απέχει μικρή απόσταση ε από το x , τότε το ερώτημα είναι, πόσο ικανοποιητική μπορεί να είναι η προσεγγιστική λύση. Ο σκοπός της παρούσας ενότητας είναι να επιχειρήσουμε να απαντήσουμε σε αυτό το ερώτημα.



Σχήμα 2.3 Ορθογώνιες και πλάγιες προβολές.

Έστω P_K ο ορθογώνιος πίνακας προβολής επί του υποχώρου $\mathcal{K}$, και Q_K^L ο πίνακας (πλάγιας) προβολής επί του $\mathcal{K}$ και ορθογωνίως προς τον $\mathcal{L}$. Αυτοί οι πίνακες προβολής ορίζονται από

$$\begin{aligned} P_K x &\in \mathcal{K}, \quad x - P_K x \perp \mathcal{K}, \\ Q_K^L x &\in \mathcal{K}, \quad x - Q_K^L x \perp \mathcal{L}, \end{aligned}$$

και απεικονίζονται στο Σχήμα 2.3. Το σύμβολο A_m χρησιμοποιείται για να συμβολίσει τον τελεστή

$$A_m = Q_K^L A P_K,$$

και υποθέτουμε, χωρίς απώλεια της γενίκευσης, ότι x_0 . Τότε, με βάση την ιδιότητα, το προσεγγιστικό πρόβλημα το οποίο ορίζεται στις (2.5) μπορεί να αναδιατυπωθεί ως εξής: βρίσκω $\tilde{x} \in K$ τέτοιο ώστε

$$Q_K^L(b - A\tilde{x}) = 0,$$

ή, ισοδύναμα,

$$A_m \tilde{x} = Q_K^L b, \quad \tilde{x} \in K.$$

Έτσι, ένα n -διάστατο γραμμικό σύστημα προσεγγίζεται από ένα m -διάστατο.

Η παρακάτω πρόταση εξετάζει τί συμβαίνει στην ειδική περίπτωση, όταν ο υποχώρος K είναι αμετάβλητος σε σχέση με τον A . Αυτή είναι μία σπάνια περίπτωση στην πράξη, όμως το αποτέλεσμα συμβάλλει στην κατανόηση της διασπαστικής συμπεριφοράς των μεθόδων που θα εξετάσουμε στα επόμενα κεφάλαια.

Πρόταση 2.6 Υποθέτουμε ότι ο K είναι αμετάβλητος σε σχέση με τον A , $x_0 = 0$, και το b ανήκει στον K . Τότε, η προσεγγιστική λύση που λαμβάνεται από οποιαδήποτε μέθοδο (πλάγιας ή ορθογώνιας) προβολής επί του K είναι ακριβής.

Απόδειξη. Η προσεγγιστική λύση $\tilde{x}$ ορίζεται από την

$$Q_K^L(b - A\tilde{x}) = 0,$$

όπου $\tilde{x}$ είναι ένα μη μηδενικό διάνυσμα στον $\mathcal{K}$. Το δεξί σκέλος b βρίσκεται στον $\mathcal{K}$, οπότε έχουμε $\mathcal{Q}_{\mathcal{K}}^{\mathcal{L}} b = b$. Ομοίως, το $\tilde{x}$ ανήκει στον $\mathcal{K}$, ο οποίος είναι αμετάβλητος σε σχέση με τον A , και συνεπώς,

$$\mathcal{Q}_{\mathcal{K}}^{\mathcal{L}} A \tilde{x} = A \tilde{x}$$

Τότε η παραπάνω εξίσωση γίνεται

$$b - A \tilde{x} = 0,$$

αποδεικνύοντας ότι το $\tilde{x}$ είναι ακριβής λύση.

Το αποτέλεσμα μπορεί να προεκταθεί με ήσσονα σημασία στην περίπτωση όπου $x_0 \neq 0$. Η υπόθεση που απαιτείται σε αυτήν την περίπτωση είναι το αρχικό υπόλοιπο $r_0 = b - Ax_0$ να ανήκει στον αμετάβλητο υποχώρο $\mathcal{K}$.

Ένα σημαντικό μέγεθος των ιδιοτήτων σύγκλισης των μεθόδων προβολής είναι η απόσταση $\|(I - \mathcal{P}_{\mathcal{K}})x_*\|_2$ της ακριβούς λύσης x_* από τον υποχώρο $\mathcal{K}$. Αυτό το μέγεθος παίζει σημαντικό ρόλο στην ανάλυση των μεθόδων προβολής. Παρατηρούμε ότι η λύση x_* δεν μπορεί να προσεγγιστεί ικανοποιητικά από τον $\mathcal{K}$, αν το $\|(I - \mathcal{P}_{\mathcal{K}})x_*\|_2$ δεν είναι μικρό, διότι

$$\|\tilde{x} - x_*\|_2 \geq \|(I - \mathcal{P}_{\mathcal{K}})x_*\|_2.$$

Το θεμελιώδες μέγεθος $\|(I - \mathcal{P}_{\mathcal{K}})x_*\|_2 / \|x_*\|_2$ είναι το $\sin$ της οξείας γωνίας μεταξύ της λύσης x_* και του υποχώρου $\mathcal{K}$. Το παρακάτω θεώρημα δείχνει το άνω όριο της νόρμας υπολοίπου της ακριβούς λύσης σε σχέση με τον τελεστή προσέγγισης A_m .

Θεώρημα 2.1 Έστω (τύπος) και υποθέτουμε ότι το b είναι μέλος του $\mathcal{K}$ και $x_0 = 0$. Τότε η ακριβής λύση x_* του αρχικού προβλήματος είναι τέτοια ώστε

$$\|b - A_m x_*\|_2 \leq \gamma \|(I - \mathcal{P}_{\mathcal{K}})x_*\|_2. \quad (2.9)$$

Απόδειξη. Εφόσον $b \in \mathcal{K}$, τότε

$$\begin{aligned}
b - A_m x_* &= \mathcal{Q}_\kappa^\mathcal{L}(b - A\mathcal{P}_\kappa x_*) \\
&= \mathcal{Q}_\kappa^\mathcal{L}(Ax_* - A\mathcal{P}_\kappa x_*) \\
&= \mathcal{Q}_\kappa^\mathcal{L}A(x_* - \mathcal{P}_\kappa x_*) \\
&= \mathcal{Q}_\kappa^\mathcal{L}A(I - \mathcal{P}_\kappa)x_*.
\end{aligned}$$

Παρατηρώντας ότι $I - \mathcal{P}_\kappa$ είναι πίνακας προβολής, έπεται ότι

$$\begin{aligned}
\|b - A_m x_*\|_2 &= \|\mathcal{Q}_\kappa^\mathcal{L}A(I - \mathcal{P}_\kappa)(I - \mathcal{P}_\kappa)x_*\|_2 \\
&\leq \|\mathcal{Q}_\kappa^\mathcal{L}A(I - \mathcal{P}_\kappa)\|_2 \|(I - \mathcal{P}_\kappa)x_*\|_2,
\end{aligned}$$

η οποία ολοκληρώνει την απόδειξη.

Είναι χρήσιμο να θεωρήσουμε την ερμηνεία του θεωρήματος βάσει πινάκων. Θεωρούμε μόνο την ειδική περίπτωση των μεθόδων ορθογώνιας προβολής ($\mathcal{L} = \mathcal{K}$). Υποθέτουμε ότι ο V είναι μοναδιαίος, δηλαδή ότι η βάση $\{v_1, \dots, v_m\}$ είναι ορθοκανονική, και ότι $W = V$. Παρατηρούμε ότι $b = VV^T b$. Η ισότητα (2.9) μπορεί να αναπαρασταθεί στην βάση V ως

$$\|b - V(V^T AV)V^T x_*\|_2 \leq \gamma \|(I - \mathcal{P}_\kappa)x_*\|_2.$$

Όμως,

$$\begin{aligned}
\|b - V(V^T AV)V^T x_*\|_2 &= \|V(V^T b - (V^T AV)V^T x_*)\|_2 \\
&= \|V^T b - (V^T AV)V^T x_*\|_2.
\end{aligned}$$

Έτσι, η προβολή της ακριβούς λύσης έχει νόρμα υπολοίπου σε σχέση με τον πίνακα $B = V^T AV$, η οποία είναι η τάξη του $\|(I - \mathcal{P}_\kappa)x_*\|_2$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΜΕΘΟΔΟΙ ΥΠΟΧΩΡΟΥ KRYLOV

Τα επόμενα δύο κεφάλαια διερευνούν κάποιες μεθόδους, οι οποίες θεωρούνται επί του παρόντος μεταξύ των σημαντικότερων διαθέσιμων επαναληπτικών τεχνικών για την επίλυση μεγάλων γραμμικών συστημάτων. Οι τεχνικές αυτές στηρίζονται σε διαδικασίες προβολής, τόσο ορθογώνιας, όσο και πλάγιας, επάνω σε υποχώρους Krylov, οι οποίοι είναι υποχώροι που επεκτείνονται από διανύσματα της μορφής $p(A)v$, όπου το p είναι πολυώνυμο. Εν συντομία, οι τεχνικές αυτές προσεγγίζουν το $A^{-1}b$ κατά $p(A)b$, όπου το p είναι το «ορθό» πολυώνυμο [2], [4].

3.1 Εισαγωγή

Η γενική μέθοδος προβολής για την επίλυση του γραμμικού συστήματος

$$Ax = b, \quad (3.1)$$

εξάγει μία προσεγγιστική λύση x_m από έναν συσχετισμένο υποχώρο $x_0 + K_m$ διάστασης m θέτοντας τη συνθήκη Petrov-Galerkin

$$b - Ax_m \perp L_m,$$

όπου το L_m είναι ένας άλλος υποχώρος διάστασης m . Εδώ, το x_0 αντιπροσωπεύει μία αυθαίρετη αρχική εκτίμηση της λύσης. Η μέθοδος υποχώρου Krylov είναι αυτή, για την οποία ο υποχώρος K_m είναι ο υποχώρος Krylov

$$Km(A, r_0) = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \dots, A^{m-1}r_0\},$$

Όπου $r_0 = b - Ax_0$. Ο $K_m(A, r_0)$ θα συμβολίζεται ως K_m . Οι διαφορετικές παραλλαγές των μεθόδων υποχώρου Krylov προκύπτουν από διαφορετικές επιλογές του υποχώρου L_m και από τους τρόπους με τους οποίους προορυθμίζεται το σύστημα.

Θεωρούμενες υπό το πρίσμα της θεωρίας προσέγγισης, είναι σαφές ότι οι προσεγγίσεις που λαμβάνονται από μία μέθοδο υποχώρου Krylov είναι της μορφής

$$A^{-1}b \approx x_m = x_0 + q_{m-1}(A)r_0,$$

στην οποία το q_{m-1} είναι ένα συγκεκριμένο πολυώνυμο βαθμού $m - 1$. Στην απλούστερη περίπτωση, όπου $x_0 = 0$, τότε

$$A^{-1}b \approx q_{m-1}(A)b.$$

Με άλλα λόγια, το $A^{-1}b$ προσεγγίζεται από το $q_{m-1}(A)b$.

Μολονότι όλες οι τεχνικές παρέχουν τον ίδιο τύπο πολυωνυμικών προσεγγίσεων, η επιλογή του L_m , δηλαδή των περιορισμών που χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία αυτών των προσεγγίσεων, έχει σημαντική επίδραση στην επαναληπτική τεχνική. Δύο ευρείες επιλογές του L_m οδηγούν στις πιο γνωστές τεχνικές. Η πρώτη είναι απλά η $L_m = K_m$ και η παραλλαγή ελαχίστου υπολοίπου $L_m = AK_m$. Η δεύτερη τάξη μεθόδων στηρίζεται στον

ορισμό του L_m ως μεθόδου υποχώρου Krylov, η οποία σχετίζεται με τον A^T , δηλαδή,

$$L_m = K_m(A^T, r_0)$$

3.2 Υποχώροι Krylov

Στην ενότητα αυτή θεωρούμε τις μεθόδους προβολής των *υποχώρων Krylov*, δηλαδή, τους υποχώρους της μορφής

$$K_m(A, v) \equiv \text{span} \{v, Av, A^2 v, \dots, A^{m-1} v\} \quad (3.2)$$

οι οποίοι θα συμβολίζονται απλά με K_m εάν δεν υπάρχει ασάφεια [2], [4]. Η διάσταση του υποχώρου των προσεγγιστικών λύσεων αυξάνει κατά μία, σε κάθε βήμα της διαδικασίας προσέγγισης. Μπορούν να οριστούν κάποιες στοιχειώδεις ιδιότητες του υποχώρου Krylov. Η πρώτη ιδιότητα είναι ότι το K_m είναι ο υποχώρος όλων των διανυσμάτων στο R^n , ο οποίος μπορεί να γραφεί ως $x = p(A)v$, όπου p είναι πολυώνυμο βαθμού όχι ανώτερου του $m - 1$. Θυμηθείτε ότι το ελάχιστο πολυώνυμο ενός διανύσματος v είναι το μη μηδενικό κανονικό πολυώνυμο p του χαμηλότερου βαθμού, έτσι ώστε $p(A)v = 0$. Ο βαθμός του ελάχιστου πολυώνυμου του v σε σχέση με το A συχνά ονομάζεται *βαθμός του v σε σχέση με το A* , ή απλά *βαθμός του v* , εάν δεν υπάρχει ασάφεια. Μία συνέπεια του θεωρήματος Cayley-Hamilton είναι ότι βαθμός του v δεν υπερβαίνει το n .

Πρόταση 3.1 Έστω μ ο βαθμός του v . Τότε το K_m δεν μεταβάλλεται με βάση το A και $K_m = K_\mu$ για όλα τα $m \geq \mu$.

Αναφέρθηκε παραπάνω ότι η διάσταση του K_m είναι μη φθίνουσα. Πράγματι, η ακόλουθη πρόταση ορίζει τη διάσταση του K_m γενικά.

Πρόταση 3.2 Ο υποχώρος Krylov K_m είναι διάστασης m , αν και μόνο αν ο βαθμός μ του v σε σχέση με το A δεν είναι μικρότερος του m , δηλαδή,

$$\dim(K_m) = m \Leftrightarrow \text{grade}(v) \geq m. \quad (3.3)$$

Συνεπώς,

$$\dim(K_m) = \min \{m, \text{grade}(v)\}. \quad (3.4)$$

Απόδειξη. Τα διανύσματα $v, Av, \dots, A^{m-1}v$ αποτελούν βάση του K_m , αν και μόνο αν για οποιοδήποτε σύνολο m κλιμακωτών μεγεθών $\alpha_i, i = 0, \dots, m-1$, όπου τουλάχιστον ένα α_i είναι μη μηδενικό, ο γραμμικός συνδυασμός $\sum_{i=0}^{m-1} \alpha_i A^i v$ είναι μη μηδενικός. Αυτό ισοδυναμεί με τη συνθήκη, ότι το μόνο πολυώνυμο βαθμού $\leq m-1$, για το οποίο $p(A)v = 0$, είναι το μηδενικό πολυώνυμο. Η ισότητα (3.4) είναι συνέπεια της προηγούμενης πρότασης.

Δεδομένου ενός συγκεκριμένου υποχώρου X , ότι το $A|_X$ συμβολίζει τον περιορισμό του A στο X . Εάν το Q είναι τελεστής προβολής επί του X , η τομή του τελεστή A στο X είναι ο τελεστής του X πάνω στον εαυτό του, ο οποίος ορίζεται ως $QA|_X$. Η ακόλουθη πρόταση χαρακτηρίζει το γινόμενο των πολυωνύμων του A επί το v σε σχέση με την τομή του A στο K_m .

Πρόταση 3.3 Έστω Q_m οποιοσδήποτε τελεστής προβολής επί του K_m και A_m η τομή του A στο K_m , δηλαδή, $A_m = Q_m A|_{K_m}$. Τότε για οποιοδήποτε πολυώνυμο q βαθμού q ο οποίος δεν υπερβαίνει τον $m-1$,

$$q(A)v = q(A_m)v,$$

και για οποιοδήποτε πολυώνυμο βαθμού $\leq m$,

$$Q_m q(A)v = q(A_m)v.$$

Απόδειξη. Πρώτα αποδεικνύουμε ότι $q(A)v = q(A_m)v$ για κάθε πολυώνυμο q βαθμού $\leq m - 1$.

Αρκεί να δείξουμε την ιδιότητα των κανονικών πολυωνύμων $q_i(t) \equiv t^i$, $i = 0, \dots, m - 1$. Η απόδειξη γίνεται με επαγωγή. Η ιδιότητα είναι αληθής για το πολυώνυμο $q_0(t) \equiv 1$. Υποθέτουμε ότι είναι αληθής για $q_i(t) \equiv t^i$:

$$q_i(A)v = q_i(A_m)v.$$

Πολλαπλασιάζοντας και τα δύο σκέλη της παραπάνω εξίσωσης με A παίρνουμε

$$q_{i+1}(A)v = Aq_i(A_m)v.$$

Αν $i+1 \leq m - 1$, το διάνυσμα του αριστερού σκέλους ανήκει στο K_m , και συνεπώς αν και τα δύο σκέλη της παραπάνω εξίσωσης πολλαπλασιαστούν με Q_m , τότε

$$q_{i+1}(A)v = Q_m A q_i(A_m)v.$$

Κοιτάζοντας το δεξί σκέλος παρατηρούμε ότι το $q_i(A_m)v$ ανήκει στο K_m . Ως εκ τούτου,

$$q_{i+1}(A)v = Q_m A|_{K_m} q_i(A_m)v = q_{i+1}(A_m)v,$$

το οποίο αποδεικνύει ότι ιδιότητα είναι αληθής για $i+1$, υπό τον όρο ότι $i + 1 \leq m - 1$. Για την περίπτωση $i + 1 = m$, μένει να δειχθεί μόνο ότι $Q_m q_m(A)v$

$= q_m(A_m)v$, το οποίο έπεται από $q_{m-1}(A)v = q_{m-1}(A_m)v$, πολλαπλασιάζοντας απλά και τα δύο σκέλη με $Q_m A$.

3.3 Μέθοδος Arnoldi

Η μέθοδος Arnoldi είναι μία μέθοδος ορθογώνιας προβολής επί του K_m . Η διαδικασία παρουσιάστηκε για πρώτη φορά το 1951 ως μέσο αναγωγής ενός πυκνού πίνακα σε μορφή Hessenberg με μοναδιαίο μετασχηματισμό. Στην εργασία του, ο Arnoldi υπαινίχθηκε ότι οι ιδιοτιμές του πίνακα Hessenberg που λαμβάνονται από αριθμό βημάτων μικρότερου του n μπορούν να παρέχουν ακριβείς προσεγγίσεις κάποιων ιδιοτιμών του αρχικού πίνακα. Αργότερα ανακαλύφθηκε ότι η στρατηγική αυτή οδηγεί σε μία αποδοτική τεχνική προσέγγισης των ιδιοτιμών μεγάλων αραιών πινάκων και η τεχνική επεκτάθηκε στη συνέχεια στην επίλυση μεγάλων αραιών γραμμικών συστημάτων εξισώσεων. Η μέθοδος θα περιγραφεί πρώτα θεωρητικά, δηλαδή υποθέτοντας την ακριβή αριθμητική, και στη συνέχεια θα αναλυθούν οι λεπτομέρειες εφαρμογής [2], [4].

3.3.1 Ο Βασικός Αλγόριθμος

Η διαδικασία Arnoldi είναι ένας αλγόριθμος για τη δημιουργία ορθογώνιας βάσης υποχώρου Krylov K_m . Με ακριβή αριθμητική, μία παραλλαγή του αλγόριθμου είναι η εξής:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 3.1 *Arnoldi*

Επέλεξε ένα διάνυσμα v_1 , τέτοιο ώστε $\|v_1\|_2 = 1$

Για $j = 1, 2, \dots, m$:

Υπολόγισε $h_{ij} = (Av_j, v_i)$ for $i = 1, 2, \dots, j$

Υπολόγισε $w_j := Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij} v_i$

$h_{j+1,j} = \|w_j\|_2$

Εάν $h_{j+1,j} = 0$ τότε Σταμάτησε

$v_{j+1} = w_j/h_{j+1,j}$

Τέλος

Σε κάθε βήμα, ο αλγόριθμος πολλαπλασιάζει το προηγούμενο διάνυσμα Arnoldi v_j με A και στη συνέχεια ορθοκανονικοποιεί το προκύπτων διάνυσμα w_j έναντι όλων των προηγούμενων v_i μέσω της κλασικής μεθόδου Gram-Schmidt. Θα σταματήσει εάν το διάνυσμα w_j , το οποίο υπολογίστηκε στη γραμμή 4, απαλειφθεί.

Πιο αναλυτικά σαν είσοδοι του αλγορίθμου είναι ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ και το διάνυσμα $v_1 \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, με $m \ll n$ και εξόδους τον πίνακα H και ένα σύνολο ορθοκανονικών διανυσμάτων $\{v_1, v_2, \dots, v_m\} = v_m$.

$$H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & \dots & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & \dots & h_{2m} \\ \vdots & h_{32} & \ddots & \vdots & h_{3m} \\ 0 & \vdots & \dots & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & h_{m+1,m} \end{pmatrix} \text{ και}$$

$$A(v_1, \dots, v_m) = (v_1, \dots, v_m, v_{m+1}) \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & \dots & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & \dots & h_{2m} \\ \vdots & h_{32} & \ddots & \vdots & h_{3m} \\ 0 & \vdots & \dots & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & h_{m+1,m} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Το v_1 επιλέγεται ώστε $v_1 = v / \|v\|_2$ όπου το v είναι το αρχικό μας διάνυσμα.

Πρώτο Βήμα: Υπολογίζουμε το v_2 και την πρώτη στήλη του $\tilde{H}_m$

$$Av_1 = h_{11}v_1 + h_{21}v_2$$

Πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση με το v_1^T , έχουμε :

$$v_1^T Av_1 = h_{11}$$

(αφού $v_1^T v_1 = 1$ και $v_1^T v_2 = 0$, λόγω κατασκευής των $v_1, v_2, \dots, v_{m+1}$)

Θέτοντας

$$\hat{v} = Av_1 - h_{11}v_1$$

Παίρνουμε,

$$h_{21} = \|\hat{v}\|_2$$

και μετά θέτουμε:

$$v_2 = \frac{\hat{v}}{\|\hat{v}\|} = \frac{\hat{v}}{h_{21}}$$

Βήμα 2: (Υπολογισμός v_3 και δεύτερης στήλης του $\tilde{H}_m$)

Συγκρίνοντας τις εισόδους της δεύτερης στήλης και στα δύο μέλη της εξίσωσης (3.5) προκύπτει:

$$Av_2 = h_{12}v_1 + h_{22}v_2 + h_{32}v_3 \quad (*)$$

Πολλαπλασιάζοντας την $(*)$ με v_1^T προκύπτει:

$$v_1^T Av_2 = h_{12}$$

Θέτουμε

$$\hat{v}_1 = Av_2 - h_{12}v_1$$

Πολλαπλασιάζοντας την $(*)$ με v_2^T παίρνουμε:

$$v_2^T Av_2 = v_2^T h_{12}v_1 + h_{22}$$

$$\Rightarrow h_{22} = v_2^T (Av_2 - h_{12}v_1) = v_2^T \hat{v}_1$$

Θέτουμε:

$$\hat{v}_2 = \hat{v}_1 - h_{22}v_2$$

και παίρνουμε:

$$h_{32} = \|\hat{v}_2\|_2$$

$$v_3 = \frac{\hat{v}_2}{h_{32}}$$

Τα άλλα βήματα είναι ανάλογα.

Βήμα k : (Υπολογισμός v_{k+1} και k -στήλης του $\tilde{H}_m$)

Ο υπολογισμός του $v_{\kappa+1}$ και της κ -στήλης του $\tilde{H}_m$) γίνεται από την αναδρομική σχέση:

$$Av_{\kappa} = h_{1\kappa} v_1 + \dots + h_{\kappa\kappa} v_{\kappa} + h_{\kappa+1,\kappa} v_{\kappa+1} \quad (3.6)$$

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι τα $\{v_1, \dots, v_{\kappa}\}$ είναι ορθοκανονικά.

Τώρα αποδεικνύονται ορισμένες απλές ιδιότητες του αλγόριθμου.

Πρόταση 3.4 Υποθέτουμε ότι ο Αλγόριθμος 3.1 δεν σταματά πριν το μ -οστό βήμα. Τότε τα διανύσματα $v_1, v_2, \dots, v_m$ σχηματίζουν ορθοκανονική βάση του υποχώρου Krylov

$$K_m = \text{span}\{v_1, Av_1, \dots, A^{m-1}v_1\}.$$

Απόδειξη. Τα διανύσματα $v_j, j = 1, 2, \dots, m$, είναι ορθοκανονικά εκ της κατασκευής τους. Το ότι εκτείνονται κατά K_m επάγεται από το γεγονός ότι το κάθε διάνυσμα v_j είναι της μορφής $q_{j-1}(A)v_1$, όπου q_{j-1} είναι πολυώνυμο βαθμού $j-1$. Αυτό μπορεί ναδειχθεί με επαγωγή επί του j ως ακολούθως. Το αποτέλεσμα είναι σαφώς αληθές για $j=1$, αφού $v_1 = q_0(A)v_1$ με $q_0(t) \equiv 1$. Υποθέτουμε ότι το αποτέλεσμα είναι αληθές για όλους τους ακέραιους $\leq j$ και θεωρούμε ότι v_{j+1} . Έχουμε

$$h_{j+1,j}v_{j+1} = Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij}v_i = Aq_{j-1}(A)v_1 - \sum_{i=1}^j h_{ij}q_{i-1}(A)v_1 \quad (3.7)$$

η οποία δείχνει ότι το v_{j+1} μπορεί να εκφραστεί ως $q_j(A)v_1$, όπου q_j είναι ο βαθμός του j και ολοκληρώνει την απόδειξη.

Πρόταση 3.5 Συμβολίζουμε με V_m τον πίνακα $n \times m$ με διανύσματα στήλες $v_1, \dots, v_m$, με $\bar{H}_m$ τον πίνακα Hessenberg $(m+1) \times m$, οι μηδενικοί όροι h_{ij} του οποίου ορίζονται από τον Αλγόριθμο 6.1, και με H_m τον πίνακα που λαμβάνεται από το $\bar{H}_m$ διαγράφοντας τη τελευταία γραμμή του. Στη συνέχεια, ισχύουν οι εξής σχέσεις:

$$AV_m = V_m H_m + w_m e_m^T \quad (3.7)$$

$$= V_{m+1} \bar{H}_m, \quad (3.8)$$

$$V_m^T AV_m = H_m. \quad (3.9)$$

Απόδειξη. Η σχέση (6.7) επάγεται από την ακόλουθη ισότητα, η οποία είναι άμεση συνέπεια των γραμμών 4, 5 και 7 του Αλγορίθμου 6.1.

$$Av_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{ij} v_i, \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (3.10)$$

Η σχέση (3.7) είναι αναδιατύπωση της σχέσης (3.10) σε πίνακα. Η σχέση (3.9) επάγεται με πολλαπλασιασμό αμφοτέρων των σκελών της (3.7) με V_m^T και κάνοντας χρήση της ορθοκανονικότητας του $\{v_1, \dots, v_m\}$.

Το αποτέλεσμα της πρότασης απεικονίζεται στο Σχήμα 3.1.

$$A \cdot V_m = V_m \cdot H_m + w_m e_m^T$$

Σχήμα 3.1: Η πράξη του A επί το V_m δίνει το $V_m H_m$ πλέον ενός πίνακα πρώτης τάξης.

Όπως σημειώθηκε προηγουμένως, ο αλγόριθμος μπορεί να διασπαστεί σε περίπτωση που ο τύπος w_j απαλειφθεί σε ένα ορισμένο βήμα j . Στην περίπτωση αυτή, το διάνυσμα v_{j+1} δεν μπορεί να υπολογιστεί και ο αλγόριθμος διακόπτεται. Απομένει να προσδιοριστούν οι συνθήκες υπό τις οποίες λαμβάνει χώρα αυτή η κατάσταση.

Πρόταση 3.6 Ο αλγόριθμος *Arnoldi* διασπάται στο βήμα j (δηλαδή, $h_{j+1,j} = 0$ στη Γραμμή 5 του Αλγορίθμου 3.1), αν και μόνο αν το ελάχιστο πολυώνυμο του v_1 είναι βαθμού j . Επιπλέον, σε αυτήν την περίπτωση ο υποχώρος K_j είναι αμετάβλητος δυνάμει του A .

Απόδειξη. Εάν ο βαθμός του ελαχίστου πολυωνύμου είναι j , τότε το w_j θα πρέπει να ισούται με μηδέν. Πράγματι, διαφορετικά το v_{j+1} μπορεί να οριστεί, και ως αποτέλεσμα το K_{j+1} θα ήταν διάστασης $j+1$. Τότε η Πρόταση 3.2 θα συνεπαγόταν ότι $m \geq j+1$, το οποίο είναι άτοπο. Για να αποδειχθεί το αντίστροφο, υποθέτουμε ότι $w_j = 0$. Τότε ο βαθμός μ του ελαχίστου

πολυωνύμου v_1 είναι τέτοιος ώστε $m \leq j$. Επιπλέον, είναι αδύνατον να ισχύει $m < j$. Διαφορετικά, βάσει του πρώτου μέρους της παρούσας απόδειξης, το διάνυσμα w_μ θα ήταν μηδενικό και ο αλγόριθμος θα είχε διακοπεί στο προηγούμενο βήμα με αριθμό μ . Το υπόλοιπο αποτέλεσμα επάγεται από την Πρόταση 3.1.

3.4 Υλοποίηση Του Αλγορίθμου 3.1

Στην προηγούμενη περιγραφή της διαδικασίας Arnoldi, λήφθηκε ακριβής αριθμητική, κυρίως για λόγους απλότητας. Στην πράξη, πολλά μπορεί να είναι τα οφέλη της χρήσης του Τροποποιημένου αλγορίθμου Gram-Schmidt ή του αλγορίθμου Householder, αντί του βασικού αλγορίθμου Gram-Schmidt. Με την εναλλακτική επιλογή του Τροποποιημένου Gram-Schmidt, ο αλγόριθμος λαμβάνει την εξής μορφή:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 3.2 *Arnoldi-Τροποποιημένος Gram-Schmidt*

1. *Επέλεξε ένα διάνυσμα v_1 του τύπου 1*
2. *Για $j = 1, 2, \dots, m$ Κάνε:*
3. *Υπολόγισε $w_j = Av_j$*
4. *Για $i = 1, \dots, j$ Κάνε:*
5. *$h_{ij} = (w_j, v_i)$*
6. *$w_j := w_j - h_{ij}v_i$*
7. *Τέλος Κάνε*

8. $h_{j+1,j} = \|w_i\|_2$. Αν $h_{j+1,j} = 0$ Σταμάτησε
9. $v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j}$
10. Τέλος Κάνε

Σε ακριβή αριθμητική, αυτός ο αλγόριθμος και ο Αλγόριθμος 3.1 είναι μαθηματικά ισοδύναμοι. Με την ύπαρξη στρογγυλοποίησης, η παραπάνω διατύπωση είναι πολύ πιο αξιόπιστη. Ωστόσο, υπάρχουν περιπτώσεις όπου οι διαγραφές είναι τόσο σοβαρές στα βήματα της ορθογωνιοποίησης που ακόμη και η επιλογή του Τροποποιημένου Gram-Schmidt είναι ανεπαρκής. Σε αυτήν την περίπτωση, μπορούν να χρησιμοποιηθούν δύο περαιτέρω βελτιώσεις.

Η πρώτη βελτίωση καταφεύγει στη διπλή ορθογωνιοποίηση. Όποτε υπολογίζεται το τελικό διάνυσμα w_j , το οποίο λαμβάνεται στο τέλος του κυρίου βρόγχου του ανωτέρω αλγορίθμου, πραγματοποιείται έλεγχος για να συγκριθεί ο τύπος του με τον τύπο του αρχικού w_j (ο οποίος είναι $\|Av_j\|_2$). Εάν η μείωση καταλήξει κάτω από ένα συγκεκριμένο όριο, το οποίο αποτελεί ένδειξη ότι μπορεί να έχει συμβεί σοβαρή απαλοισή, πραγματοποιείται μία δεύτερη ορθογωνιοποίηση.

Η δεύτερη βελτίωση είναι η χρήση μίας εντελώς διαφορετικής τεχνικής. Από αριθμητικής άποψης, μία από τις πιο αξιόπιστες τεχνικές ορθογωνιοποίησης είναι ο αλγόριθμος Householder. Θυμηθείτε ότι η ορθογωνιοποίηση Householder χρησιμοποιεί πίνακες αντανάκλασης της μορφής $P_k = I - 2w_k w_k^T$ για τον μετασχηματισμό ενός πίνακα X σε άνω τριγωνική μορφή. Στον αλγόριθμο Arnoldi, τα διανύσματα στήλης του πίνακα X προς ορθοκανονικοποίηση δεν είναι διαθέσιμα εκ των προτέρων.

Στον αλγόριθμο Householder λαμβάνεται μία ορθογώνια στήλη v_i ως $P_1 P_2 \dots P_i e_i$, όπου $P_1, \dots, P_i$ είναι οι προηγούμενοι πίνακες Householder. Το

διάνυσμα αυτό πολλαπλασιάζεται στη συνέχεια με A και οι προηγούμενοι μετασχηματισμοί Householder εφαρμόζονται σε αυτό. Έπειτα, ο επόμενος μετασχηματισμός Householder προσδιορίζεται από το προκύπτον διάνυσμα. Η διαδικασία αυτή περιγράφεται στον ακόλουθο αλγόριθμο, ο οποίος προτάθηκε αρχικά από τον Walker.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 3.3 *Householder Arnoldi*

1. *Επέλεξε ένα μη μηδενικό διάνυσμα v , Θέσε $z_1 = v$*
2. *Για $j = 1, m, m+1$:*
3. *Υπολόγισε το μοναδιαίο διάνυσμα Householder w_j , τέτοιο ώστε*
4. *$(w_j)_i = 0, i = 1, \dots, j-1$ και*
5. *$(P_j z_j)_i = 0, i = j+1, \dots, n$, όπου $P_j = I - 2w_j w_j^T$*
6. *$h_{j-1} = P_j z_j$*
7. *$v_j = P_1 P_2 \dots P_j e_j$*
8. *Αν $j \leq m$ υπολόγισε $z_{j+1} : P_j P_{j-1} \dots P_1 A v_j$*
9. *Τέλος*

Για λεπτομέρειες σχετικά με τον προσδιορισμό του διανύσματος Householder w_j στην τρίτη με πέμπτη γραμμή και τη χρήση του στην έκτη με όγδοη γραμμή. Θυμηθείτε ότι οι πίνακες P_j δεν χρειάζεται να έχουν σαφή μορφή. Για να λάβουμε h_{j-1} από το z_j στη γραμμή 6, απαλείψτε όλα τα στοιχεία από τη θέση $j+1$ έως n του n -οστού διανύσματος z_j και αλλάξτε το j -οστό στοιχείο του, αφήνοντας όλα τα υπόλοιπα αμετάβλητα. Έτσι, ο πίνακας $n \times m$ $[h_0, h_1, \dots, h_m]$ θα έχει την ίδια δομή με τον πίνακα X_m . Σε σύγκριση με τον αλγόριθμο

Householder, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι η παραπάνω διαδικασία υπολογίζει την παραγοντοποίηση QR του πίνακα $v, Av_1, Av_2, Av_3, \dots, Av_m$. Ορίζουμε

$$Q_j = P_j P_{j-1} \dots P_1. \quad (3.11)$$

Ο ορισμός του z_{j+1} στη γραμμή 8 του αλγορίθμου παράγει τη σχέση,

$$Q_j Av_j = z_{j+1}.$$

Μετά την εφαρμογή του επόμενου μετασχηματισμού Householder P_{j+1} στη γραμμή 6, το h_j πληροί τη σχέση,

$$h_j = P_{j+1} z_{j+1} = P_{j+1} Q_j Av_j = Q_{j+1} Av_j. \quad (3.11)$$

Παρατηρούμε τώρα ότι αφού τα στοιχεία $j+2, \dots, n$ του h_j είναι μηδενικά, τότε $P_i h_j = h_j$ για κάθε $i \dots j+2$. Συνεπώς,

$$h_j = P_m P_{m-1} \dots P_{j+2} h_j = Q_m Av_j, j = 1, \dots, m.$$

Αυτό οδηγεί στην παραγοντοποίηση,

$$Q_m[v, Av_1, Av_2, \dots, Av_m] = [h_0, h_1, \dots, h_m] \quad (3.12)$$

όπου ο πίνακας $[h_0, \dots, h_m]$ είναι $n \times (m+1)$ και άνω τριγωνικός και ο Q_m είναι μοναδιαίος.

Είναι σημαντικό να συσχετίσουμε τα διανύσματα v_i και h_i , τα οποία ορίζονται σε αυτόν τον αλγόριθμο, με διανύσματα της βασικής διαδικασίας Arnoldi. Έστω ότι $\bar{H}_m$ είναι ο $(m+1) \times m$ πίνακας που λαμβάνεται από τις πρώτες $m+1$

γραμμές του πίνακα $n \times m$ $[h_1, \dots, h_m]$. Αφού το Q_{j+1} είναι μοναδιαίος έχουμε $Q_{j+1}^{-1} = Q_{j+1}^T$ και συνεπώς, από τη σχέση (3.11)

$$Av_j = Q_{j+1}^T \sum_{i=1}^{j+1} h_{ij} e_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{ij} Q_{j+1}^T e_i$$

όπου έκαστο e_i είναι η i -οστή στήλη του $n \times n$ μοναδιαίου πίνακα. Αφού $P_k e_i = e_i$ για $i < k$, δεν είναι δύσκολο να διαπιστώσουμε ότι

$$Q_{j+1}^T e_i = P_i \dots P_{j+1} e_i = v_i, \text{ για } i \leq j+1. \quad (3.13)$$

Αυτό παράγει τη σχέση $Av_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{ij} v_i$, για $j = 1, \dots, m$, η οποία μπορεί να γραφεί σε μορφή πίνακα ως

$$AV_m = V_{m+1} \bar{H}_m.$$

Αυτή είναι ταυτόσημη με τη σχέση (6.7), η οποία λαμβάνεται με την εφαρμογή Gram-Schmidt ή Τροποποιημένου Gram-Schmidt. Τα v_i σχηματίζουν μία ορθοκανονική βάση του υποχώρου Krylov K_m , και είναι ταυτόσημα με τα v_i , τα οποία ορίζονται με τη διαδικασία Arnoldi, εκτός της ενδεχόμενης διαφοράς συμβόλου.

Μολονότι ο αλγόριθμος Householder είναι αριθμητικά πιο εφικτός από τις παραλλαγές Gram-Schmidt ή Τροποποιημένου Gram-Schmidt, είναι επίσης πιο δαπανηρός. Το μεγαλύτερο μέρος του κόστους εκάστου εξωτερικού βρόγχου, ο οποίος αντιστοιχεί στη μεταβλητή ελέγχου j , καταλαμβάνεται από τις γραμμές 7 και 8. Οι γραμμές αυτές εφαρμόζουν τους πίνακες αντανάκλασης P_i για $i = 1, \dots, j$ σε ένα διάνυσμα, εκτελούν το γινόμενο του πίνακα επί το διάνυσμα Av_j , και στη συνέχεια εφαρμόζουν τους πίνακες P_i για $i = j, j-1, \dots, 1$ σε ένα διάνυσμα. Η εφαρμογή κάθε P_i σε ένα διάνυσμα εκτελείται ως

$$(I - 2w_i w_i^T)v = v - \sigma w_i \text{ με } \sigma = 2w_i^T v.$$

Αυτό είναι ουσιαστικά το αποτέλεσμα ενός εσωτερικού γινομένου μήκους $n - i + 1$ το οποίο ακολουθείται από μία ενημέρωση διανύσματος του ιδίου μήκους, η απαιτεί συνολικά περίπου $4(n - i + 1)$ πράξεις για κάθε εφαρμογή του P_i . Παραλείποντας το τελευταίο βήμα, ο αριθμός των πράξεων που οφείλονται αποκλειστικά στους μετασχηματισμούς Householder είναι συνολικά κατά προσέγγιση

$$\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^j 8(n - i + 1) = 8 \sum_{j=1}^m \left(jn - \frac{j(j-1)}{2} \right) \approx 4m^2 n - \frac{4}{3} m^3.$$

Ο παρακάτω πίνακας δείχνει τα κόστη διαφόρων διαδικασιών ορθογωνιοποίησης. GS σημαίνει Gram-Schmidt, MGS Τροποποιημένος Gram-Schmidt, MGSR Τροποποιημένος Gram-Schmidt για ορθογωνιοποίηση εκ νέου, και HO Householder.

	GS	MGS	MGSR	HO
Πράξεις κινητής υποδιαστολής ανά δευτερόλεπτο	$2m^2 n$	$2m^2 n$	$4m^2 n$	$4m^2 n - \frac{4}{3} m^3$
Αποθήκευση	$(m+1)n$	$(m+1)n$	$(m+1)n$	$(m+1)n - \frac{1}{2} m^2$

Ο αριθμός των πράξεων που εμφανίζονται για τη MGSR αντιστοιχεί στο σενάριο της χειρότερης περίπτωσης με μία δεύτερη ορθογωνιοποίηση να πραγματοποιείται κάθε φορά. Στην πράξη, ο αριθμός των πράξεων είναι συνήθως πιο κοντά προς τη συνήθη MGS. Σχετικά με την αποθήκευση, τα

διανύσματα v_i , $i = 1, \dots, m$ δεν χρειάζεται να αποθηκευτούν. Στους αλγόριθμους επίλυσης γραμμικών συστημάτων, τα διανύσματα αυτά χρειάζονται στο τέλος της διαδικασίας. Το θέμα αυτό θα καλυφθεί με τις εφαρμογές Householder αυτών των αλγόριθμων.

Προς το παρόν, υποθέτουμε ότι μόνο τα w_i αποθηκεύονται. Το μικρό κέρδος χρήσης της μνήμης στην παραλλαγή Householder μπορεί να ερμηνευτεί με τα φθίνοντα μήκη των διανυσμάτων που απαιτούνται σε κάθε βήμα του μετασχηματισμού Householder. Ωστόσο, η διαφορά αυτή είναι αμελητέα σε σχέση με τις συνολικές απαιτήσεις αποθήκευσης του αλγόριθμου, διότι συνήθως, $m \ll n$.

Η ορθογωνιοποίηση Householder μπορεί να είναι μία λογική επιλογή κατά την ανάπτυξη αξιόπιστων λογισμικών πακέτων γενικής χρήσης, όπου η ανθεκτικότητα είναι κριτήριο κρίσιμης σημασίας. Αυτό ισχύει ιδιαίτερα για την επίλυση προβλημάτων ιδιοτιμής αφού το κόστος της ορθογωνιοποίησης στη συνέχεια αποσβένεται σε πολλούς υπολογισμούς ιδιοτιμών/ιδιοδιανυσμάτων. Κατά την επίλυση γραμμικών συστημάτων, η ορθογωνιοποίηση Τροποποιημένου Gram-Schmidt, με στρατηγική ορθογωνιοποίησης εκ νέου, η οποία στηρίζεται στο μέτρο του επιπέδου ακύρωσης, είναι περισσότερο από επαρκής στις περισσότερες περιπτώσεις.

3.5 Ο Συμμετρικός Αλγόριθμος Lanczos

Ο συμμετρικός αλγόριθμος Lanczos αποτελεί απλούστευση της μεθόδου Arnoldi για την ειδικότερη περίπτωση όπου ο πίνακας είναι συμμετρικός. Όταν ο A είναι συμμετρικός, τότε ο πίνακας Hessenberg H_m γίνεται συμμετρικός

τριδιαγώνιος. Αυτό οδηγεί σε μια τριών όρων επανάληψη της διαδικασίας Arnoldi [2], [4].

3.5.1 Ο Αλγόριθμος

Για να παρουσιάσουμε τον αλγόριθμο Lanczos αρχίζουμε με τα ακόλουθα βήματα.

Θεώρημα 2.2 Θεωρούμε ότι η μέθοδος Arnoldi εφαρμόζεται σε έναν πραγματικό συμμετρικό πίνακα A . Τότε οι συντελεστές h_{ij} που παράγονται από τον αλγόριθμο είναι τέτοιοι ώστε

$$h_{ij} = 0, \text{ για } 1 \leq i < j - 1, \quad (3.14)$$

$$h_{ij+1} = h_{j+1,j}, j = 1, 2, \dots, m. \quad (3.15)$$

Με άλλα λόγια, ο πίνακας H_m που λαμβάνεται από τη διαδικασία Arnoldi είναι τριδιαγώνιος και συμμετρικός.

Απόδειξη. Η απόδειξη είναι άμεση συνέπεια του γεγονότος ότι το $H_m = V_m^T A V_m$ είναι συμμετρικός πίνακας, ο οποίος είναι επίσης πίνακας Hessenberg εκ της κατασκευής. Συνεπώς, ο H_m πρέπει να είναι συμμετρικός τριδιαγώνιος πίνακας.

Ο βασικός συμβολισμός που χρησιμοποιείται για την περιγραφή του αλγόριθμου Lanczos λαμβάνεται θέτοντας

$$\alpha_j \equiv h_{jj}, \quad \beta_j \equiv h_{j-1,j},$$

και αν T_m συμβολίζει τον πίνακα H_m που προκύπτει, είναι της μορφής,

$$T_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \beta_{m-1} & \alpha_{m-1} & \beta_m \\ & & & \beta_m & \alpha_m \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Πιο αναλυτικά έχουμε τα εξής:

Στην περίπτωση που ο πίνακας A είναι συμμετρικός, ο αλγόριθμος Arnoldi (λέγεται συμμετρικός αλγόριθμος Lanczos. Σε αυτή την περίπτωση, ο άνω Hessenberg πίνακας $\tilde{H}_m$ γίνεται συμμετρικός, τριδιαγώνιος πίνακας T_m ο οποίος γράφεται στη μορφή:

$$\tilde{T}_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \beta_m \\ 0 & \cdots & \beta_m & \alpha_{m+1} \end{pmatrix}$$

Η σχέση που ισχύει στη μέθοδο Arnoldi ανάγεται στη:

$$AV_m = V_{m+1}\tilde{T}_m$$

$\Rightarrow$

$$A(v_1, \dots, v_m) = (v_1, \dots, v_m, v_{m+1}) \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \beta_m \\ 0 & \cdots & \beta_m & \alpha_{m+1} \end{pmatrix}$$

Το v_1 επιλέγεται ώστε $v_1 = \frac{v}{\|v\|_2}$ όπου v είναι το δοσμένο διάνυσμα.

Βήμα 1: (Υπολογισμός v_2, α_1 και β_1)

Συγκρίνοντας τις εισόδους της πρώτης στήλης και στα δύο μέλη της παραπάνω εξίσωσης προκύπτει:

$$Av_1 = \alpha_1 v_1 + \beta_1 v_2.$$

Θέτουμε

$$\hat{v}_2 = Av_1$$

$$\alpha_1 = v_1^T Av_1 = v_1^T \hat{v}_2.$$

Θέτοντας

$$\hat{v}_2 = \hat{v}_2 - \alpha_1 v_1$$

Παίρνουμε

$$\beta_1 = \|\hat{v}_2\|_2$$

και μετά θέτουμε :

$$v_2 = \frac{\hat{v}_2}{\beta_1}$$

Βήμα 2: (Υπολογισμός v_3, α_2 και β_2)

Συγκρίνοντας τις εισόδους της πρώτης στήλης και στα δύο μελη της εξίσωσης (1.25) προκύπτει:

$$Av_2 = \beta_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \beta_2 v_3 .$$

Θέτουμε

$$\hat{v}_3 = Av_2 - \beta_1 v_1$$

$$\alpha_2 = v_2^T (Av_2 - \beta_1 v_1) = v_2^T \hat{v}_3 .$$

Θέτοντας

$$\hat{v}_3 = \hat{v}_3 - \alpha_2 v_2$$

Παίρνουμε

$$\beta_2 = \|\hat{v}_3\|_2$$

και μετά θέτουμε:

$$v_3 = \frac{\hat{v}_3}{\beta_2} .$$

Τα άλλα βήματα είναι ανάλογα.

Η αναδρομική σχέση που ισχύει στη μέθοδο Arnoldi παίρνει τη μορφή:

$$Av_k = \beta_{k-1} v_{k-1} + \alpha_k v_k + \beta_k v_{k+1} .$$

Αυτό οδηγεί στην παρακάτω μορφή Τροποποιημένου Gram-Schmidt, η οποία αποτελεί παραλλαγή της μεθόδου Arnoldi, δηλαδή, τον Αλγόριθμο 6.2.

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ 3.4 Ο Αλγόριθμος Lanczos

1. Επέλεξε ένα αρχικό διάνυσμα v_1 μοναδιαίου διπλού τύπου. Θέσε $\beta_1 \equiv, v_0 \equiv 0$
2. Για $j = 1, 2, \dots, m$ Κάνε:
3. $w_j := Av_j - \beta_j v_j - 1$
4. $\alpha_j := (w_j, v_j)$
5. $w_j := w_j - \alpha_j v_j$
6. $\beta_{j+1} := \|w_j\|_2$. Αν β_{j+1} τότε Σταμάτησε
7. $v_{j+1} := w_j / \beta_{j+1}$
8. Τέλος Κάνε

Ο παραπάνω απλός αλγόριθμος εγγυάται, τουλάχιστον σε ακριβή αριθμητική, ότι τα διανύσματα v_i , $i = 1, 2, \dots$, είναι ορθογώνια. Πράγματι, η ακριβής ορθογωνιότητα αυτών των διανυσμάτων παρατηρείται μόνο κατά την αρχή της διαδικασίας. Σε κάποιο σημείο, τα v_i αρχίζουν να χάνουν τη γενική ορθογωνιότητά τους γρήγορα. Έχει πραγματοποιηθεί πολλή έρευνα που αφιερώθηκε στην εξεύρεση τρόπων είτε προς την ανάκτηση της ορθογωνιότητας, ή τουλάχιστον προς μείωση των συνεπειών της, μέσω μερικής ή επιλεκτικής ορθογωνιότητας.

Οι κύριες πρακτικές διαφορές της μεθόδου Arnoldi είναι ότι ο πίνακας H_m είναι τριδιαγώνιος και, πιο σημαντικό, ότι θα πρέπει να αποθηκευτούν μόνο τρία διανύσματα, εκτός αν χρησιμοποιηθεί κάποια μορφή ορθογωνιοποίησης εκ νέου.

3.5.2 Σχέση με Ορθογώνια Πολυώνυμα

Σε ακριβή αριθμητική, ο πυρήνας του Αλγόριθμου 3.4 είναι μία σχέση της μορφής

$$\beta_{j+1}v_{j+1} = Av_j - \alpha_j v_j - \beta_j v_{j-1}.$$

Η σχέση επανάληψης τριών όρων θυμίζει τη βασική σχέση επανάληψης τριών όρων τον ορθογώνιων πολυωνύμων. Πράγματι, υπάρχει πράγματι μία ισχυρή σχέση μεταξύ του αλγόριθμου Lanczos και των ορθογώνιων πολυωνύμων. Ξεκινώντας, ας θυμηθούμε ότι αν ο βαθμός του v_1 είναι $\geq m$, τότε ο υποχώρος K_m είναι διάστασης m και αποτελείται από όλα τα διανύσματα της μορφής $q(A)v_1$, όπου το q είναι πολυώνυμο βαθμού $(q) \leq m - 1$.

Σε αυτήν την περίπτωση υπάρχει ένας ακόμη ισομορφισμός μεταξύ του K_m και του P_{m-1} , του χώρου των πολυωνύμων βαθμού $\leq m - 1$, ο οποίος ορίζεται από

$$q \in P_{m-1} \rightarrow x = q(A)v_1 \in K_m.$$

Επιπλέον, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι ο υποχώρος P_{m-1} παρέχεται με το εσωτερικό γινόμενο

$$\langle p, q \rangle_{v_1} = (p(A)v_1, q(A)v_1). \quad (3.16)$$

Αυτή είναι πράγματι μία μη εκφυλισμένη διγραμμική μορφή με βάση την υπόθεση ότι το m δεν υπερβαίνει το μ , τον βαθμό του v_1 . Παρατηρούμε τώρα ότι τα διανύσματα v_i είναι της μορφής

$$v_i = q_{i-1}(A)v_1$$

και η ορθογωνιότητα των v_i μεταφράζεται σε ορθογωνιότητα των πολυωνύμων σε σχέση με το εσωτερικό γινόμενο.

Είναι γνωστό ότι τα πραγματικά ορθογώνια πολυώνυμα ικανοποιούν μία επανάληψη τριών όρων. Επιπλέον, η διαδικασία Lanczos δεν είναι τίποτε άλλο από τον αλγόριθμο Stieltjes, (βλέπε, για παράδειγμα, Gautschi) για τον υπολογισμό μίας ακολουθίας ορθογώνιων πολυωνύμων σε σχέση με το εσωτερικό γινόμενο. Είναι γνωστό ότι το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του τριδιαγώνιου πίνακα που παράγεται από τον αλγόριθμο Lanczos ελαχιστοποιεί τον τύπο $\|\cdot\|_{v_i}$ των μονικών πολυωνύμων. Η σχέση επανάληψης μεταξύ των χαρακτηριστικών πολυωνύμων των τριδιαγώνιων πινάκων δείχνει επίσης ότι η επανάληψη Lanczos υπολογίζει την ακολουθία διανυσμάτων $p_{T_m}(A)v_1$ όπου το p_{T_m} είναι χαρακτηριστικό πολυώνυμο του T_m .

3.6 Αριθμητικά Παραδείγματα

Παράδειγμα 1:

$$\text{' Εστω } A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 3 & 3 & 9 \\ 8 & 10 & 3 \end{bmatrix}, \quad v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$m = 2.$$

Θα κατασκευάσουμε $(m + 1 = 3)$ ορθοκανονικά διανύσματα και έναν 3×2 άνω Hessenberg πίνακα.

B.1.

$$\begin{aligned} h_{11} = v_1^T A v_1 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 3 & 5 & 9 \\ 8 & 10 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= 1 \end{aligned}$$

$$\text{Θέτουμε } \hat{v} = Av_1 - h_{11} v_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ 8 \end{bmatrix}$$

Υπολογίζουμε $h_{21} = \|\hat{v}\|_2 = 8.5440$

$$v_2 = \frac{\hat{v}}{h_{21}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.3511 \\ 0.9363 \end{bmatrix}$$

Υπολογίζουμε $h_{12} = v_1^T \cdot Av_2 = -1.1704$

$$\hat{u}_2 = Av_2 - h_{12} \cdot v_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 9.4803 \\ 6.3202 \end{bmatrix}$$

$$h_{22} = u_2^T \cdot \hat{u}_2 = 9.2466$$

$$\hat{u}_3 = \hat{u}_2 - h_{22} \cdot u_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 6.2336 \\ -2.3376 \end{bmatrix}$$

$$h_{32} = \|\hat{u}_3\|_2 = 6.6575$$

$$v_3 = \frac{\hat{u}_3}{h_{32}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.9363 \\ -0.3511 \end{bmatrix}$$

$$H = \begin{bmatrix} 1 & -1.1704 \\ 8.5440 & 9.2466 \\ 0 & 6.6575 \end{bmatrix}$$

Άρα η παραγοντοποίηση Arnoldi είναι $A V_2 = V_3 H$, δηλαδή

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 3 & 3 & 9 \\ 8 & 10 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.3511 \\ 0 & 0.9363 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3511 & 0.9363 \\ 0 & 0.9363 & -0.3511 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -1.1704 \\ 8.5440 & 9.2466 \\ 0 & 6.6575 \end{bmatrix}$$

Παράδειγμα 2:

Έστω ο πίνακας

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 & 0 \\ 3 & 4 & -1 & 2 \\ 5 & -1 & 4 & -3 \\ 0 & 2 & -3 & 7 \end{bmatrix} \in \mathcal{R}^{4 \times 4} \text{ συμμετρικός πίνακας}$$

Και διάνυσμα

$$v = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$m = 3$$

Θα εφαρμόσουμε το συμμετρικό αλγόριθμο Lanczos για να βρούμε $m + 1 = 4$ ορθοκανονικά διανύσματα v_i και έναν τριδιαγώνιο και συμμετρικό πίνακα $\hat{\mathcal{T}}_3$ 4×4

Αρχικό Βήμα:

Θέτουμε $\beta_0 = 0$, $v_0 = 0$ και αφού v είναι ήδη μοναδικό δεν χρειάζεται κανονικοποίηση.

Έτσι $v_1 = v$

Βήμα πρώτο:

Θα υπολογίσουμε v_2, α_1, β_1

$$\hat{v}_2 = Av_1 - \beta_0 v_0$$

$$\hat{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_1 = v_1^T \cdot \hat{v}_2$$

$$\alpha_1 = 1$$

$$\hat{v}'_2 = \hat{v}_2 - \alpha_1 v_1$$

$$\hat{v}'_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ 5 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\beta_1 = \|\hat{v}'_2\|$$

$$\beta_1 = 5.8310$$

$$v_2 = \frac{\hat{v}_2}{\beta_1} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.5145 \\ 0.8575 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Βήμα δεύτερο:

Σε αυτό το βήμα θέλουμε να υπολογίσουμε το v_3, α_2, β_2

$$\hat{v}_3 = Av_2 - \beta_1 v_1$$

$$\hat{v}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1.2005 \\ 2.9155 \\ 1.5435 \end{bmatrix}$$

$$\alpha_2 = v_2^T \hat{v}_3$$

$$\alpha_2 = 3.1176$$

$$\hat{v}'_3 = \hat{v}_3 - \alpha_2 v_2$$

$$v'_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.4035 \\ 0.2421 \\ -1.5435 \end{pmatrix}$$

$$\beta_2 = \|\hat{v}'_3\|$$

$$\beta_2 = 1.6136$$

$$v_3 = \frac{\hat{v}'_3}{\beta_2}$$

$$v_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ -0.2501 \\ 0.1500 \\ -0.9565 \end{bmatrix}$$

ΒΗΜΑ 3^ο

Υπολογισμός (v_4, α_3, β_3)

$$\hat{v}_4 = Av_3 - \beta_2 v_2$$

$$\hat{v}_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ -3.8936 \\ 2.3362 \\ -7.6460 \end{bmatrix}$$

$$\alpha_3 = v_3^T \cdot \hat{v}_4$$

$$\alpha_3 = 8.6378$$

$$\hat{v}'_4 = \hat{v}_4 - \alpha_3 v_3$$

$$\hat{v}'_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1.7335 \\ 1.0401 \\ 0.6164 \end{bmatrix}$$

$$\beta_3 = \|\hat{v}'_4\|$$

$$\beta_3 = 2,1135$$

$$v_4 = \frac{\hat{v}'_4}{\beta_3}$$

$$v_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ -0.8202 \\ 0.4921 \\ 0.2916 \end{bmatrix}$$

ΒΗΜΑ 4^ο

Υπολογισμός (α_4)

$$\hat{v}_5 = Av_4 - \beta_3 v_3$$

$$\hat{v}_5 = \begin{bmatrix} 0 \\ -2.6612 \\ 1.5967 \\ 0.9462 \end{bmatrix}$$

$$\alpha_4 = v_4^T \cdot \hat{v}_5$$

$$\alpha_4 = 3.2445$$

Αρα ο τριδιαγώνιος

$$\tilde{T}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 5.8310 & 0 & 0 \\ 5.8310 & 3.1176 & 1.6136 & 0 \\ 0 & 1.6136 & 8.6378 & 2.1135 \\ 0 & 0 & 2.1135 & 3.2445 \end{bmatrix}$$

$$v_4 = [v_1, v_2, v_3, v_4]$$

Βιβλιογραφία

[1] Γ. Δ. Ακρίβης, Β. Α. Δουγαλής, Εισαγωγή στην αριθμητική ανάλυση, 3η έκδοση, ΠΕΚ, Ηράκλειο 2009.

[2] B. N. Datta, Numerical Linear Algebra and Applications, Second Edition, SIAM, 2010.

[3] R. A. Horn, C. R. Johnson, Matrix Analysis, Cambridge University Press, 1985.

[4] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, Second Edition, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.

[5] Μ. Μητρούλη, Σημειώσεις Αριθμητικής Γραμμικής Άλγεβρας , 2011