

Αριθμητικές Μεθοδοι στην Στατιστική

ΕΝΟΤΗΤΑ 1: Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα- Επαναληπτικές μεθοδοι

Α. Ν. Γιαννακόπουλος

Ο.Π.Α

Εαρινό Εξάμ. 2026

- 1 Εισαγωγή
- 2 Βασική ιδέα
- 3 Νόρμες πινάκων και συγκλιση
- 4 Ευστάθεια και *conditioning*
- 5 Μέθοδος *Jacobi*
- 6 Μέθοδος *Gauss – Seidel*
- 7 Χαλάρωση (*relaxation*)
- 8 Προβλήματα ιδιοτιμών
- 9 Μέθοδος *Krylov* (*subspace iteration*)

Εισαγωγή

Οι επαναληπτικές μεθοδοι είναι μια εναλλακτική κατηγορία μεθόδων επίλυσης γραμμικών συστημάτων οι οποίες μερικές φορές είναι προτιμητέες έναντι των ευθείων μεθόδων (direct methods) κυρίως λόγω του γεγονότος ότι συνήθως απαιτούν μικρότερο πλήθος πράξεων.

Οι βασικότερες επαναληπτικές μέθοδοι είναι οι

- Μέθοδος Jacobi
- Μέθοδος Gauss - Seidel
- Μέθοδοι χαλάρωσης (relaxation)

Βασική ιδέα

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε να λύσουμε το γραμμικό σύστημα $Ax = b$ για $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $x, b \in \mathbb{R}^{n \times 1}$.

Η βασική ιδέα είναι να γράψουμε το σύστημα με την μορφή

$$[B + (A - B)]x = b,$$

όπου B ένας πίνακας ο οποίος είναι εύκολα αντιστρέψιμος (π.χ. διαγώνιος ή ανώ/ κάτω τριγωνικός).

Κατόπιν αναδιατάσσουμε ως

$$Bx = b - (A - B)x,$$

και

$$x = B^{-1}b - B^{-1}(A - B)x.$$

Αν $F(x) := B^{-1}b - B^{-1}(A - B)x$, τότε η λύση του προβλήματος είναι ισοδύναμη με $x = F(x)$ δηλαδή **ένα σταθερό σημείο** της συνάρτησης $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Η ανάλυση μας παρέχει μια μεγάλη ποικιλία θεωρημάτων (θεωρήματα σταθερού σημείου) τα οποία μας εξασφαλίζουν την ύπαρξη σταθερού σημείου για γενικές οικογένειες συναρτήσεων F (όχι απαραίτητα γραμμικών).

Το πιο διάσημο (και απο τα πρώτα ιστορικά) θεώρημα σε αυτή την κατηγορία είναι το θεώρημα συστολής του Banach



Ένα σύντομο ιντερλούδιο: Νόρμες πινάκων και συγκλιση

Για να μπορέσουμε να μιλήσουμε για την συγκλιση και την ακρίβεια των επαναληπτικών μεθόδων θα πρέπει να αναφέρουμε ορισμένα στοιχεία σχετικά με τις νορμες πινάκων.

Ορισμός (Νόρμες διανυσμάτων)

Μία νορμα σε ένα διανυσματικό χώρο X είναι μια απεικόνιση $\|\cdot\| : X \rightarrow \mathbb{R}_+$ που ικανοποιεί τις συνθήκες

- 1 $\|x\| \geq 0$ για κάθε $x \in X$ με $\|x\| = 0$ αν και μόνο αν $x = 0$.
- 2 $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$ για κάθε $\lambda \in \mathbb{R}$.
- 3 $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ για κάθε $x, y \in X$.

Εμείς εδώ σαν διανυσματικό χώρο X θα παίρνουμε τον $X = \mathbb{R}^n$ ή τον $X = \mathbb{C}^n$.

Παραδείγματα νορμών στον $\mathbb{R}^n$ είναι η οικογένεια νορμών

$$\|x\|_p = \left\{ \sum_{i=1}^n |x_i|^p \right\}^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty.$$

Για να μπορέσουμε να μιλήσουμε για την συγκλιση και την ακρίβεια των επαναληπτικών μεθόδων θα πρέπει να αναφέρουμε ορισμένα στοιχεία σχετικά με τις νορμες πινάκων.

Ορισμός (Νόρμες πινάκων)

Μία νορμα πινάκων σε ένα χώρο πινάκων $\mathbb{M}$ είναι μια απεικόνιση $\|\cdot\| : \mathbb{M} \rightarrow \mathbb{R}_+$ που ικανοποιεί τις συνθήκες

- 1 $\|A\| \geq 0$ για κάθε $A \in \mathbb{M}$ με $\|A\| = 0$ αν και μόνο αν $A = 0$.
- 2 $\|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|$ για κάθε $\lambda \in \mathbb{R}$.
- 3 $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ για κάθε $A, B \in \mathbb{M}$.
- 4 $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$

Παρόλο που ο $\mathbb{M}$ (π.χ. ο $\mathbb{R}^{n \times m}$ ή ο $\mathbb{C}^{n \times m}$) είναι διανυσματικός χώρος ισομορφος με τον $\mathbb{R}^{nm}$ (ή τον $\mathbb{C}^{nm}$), οποιαδήποτε διανυσματική νόρμα των παραπάνω χώρων δεν είναι απαραίτητα και νορμα πίνακα, δεδομένου ότι οποιαδήποτε διανυσματική νόρμα δεν ικανοποιεί την ιδιότητα 4!

Παραδείγματα

1. $\|A\|_1 = \max_{1 \leq k \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{jk}|$ (μέγιστο της ℓ_1 νόρμας της κάθε στήλης)
2. $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{k=1}^m |a_{jk}|$ (μέγιστο της ℓ_1 νόρμας της κάθε γραμμής)
3. $\|A\|_2 = \max\{\sqrt{\lambda} : A^T A v = \lambda v\}$ (η μέγιστη ιδιοτιμή του πίνακα $A^T A$).
4. Η νόρμα του Frobenius

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^m |a_{jk}|^2} = \sqrt{\text{Tr}(A^T A)} = \sqrt{\sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sigma_i(A)^2},$$

όπου σ_i οι ιδιάζουσες τιμές (singular values) του A .

$$5. \|A\|_p = \left(\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^m |a_{jk}|^p \right)^{1/p}$$

6. Οι νορμες του Schatten

$$\|A\|_{S,p} = \left(\sum_{i=1}^{\min(m,n)} \sigma_i(A)^p \right)^{1/p}.$$

Νόρμες πινάκων που επάγονται απο διανυσματικές νόρμες

Μία γενική κατηγορία νορμών πινάκων είναι αυτές οι οποίες επάγονται απο διανυσματικές νόρμες.

Ορισμός (Νόρμες πινάκων που επάγονται απο διανυσματικές νόρμες)

Ας πάρουμε $X = \mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m$ ή $\mathbb{C}^n, \mathbb{C}^m$, εφοδιασμένους με κάποια διανυσματική νόρμα $\|\cdot\|$, και ένα πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ή $\mathbb{C}^{n \times m}$.

Η νόρμα του πίνακα A που συνδέεται με την διανυσματική νόρμα $\|\cdot\|$, είναι η

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|.$$

Παραδείγματα τέτοιων νορμών είναι τα παραδείγματα 1,2 και 3 της προηγούμενης διαφάνειας.

Οι νόρμες πινάκων που επάγονται απο διανυσματικές νόρμες έχουν την εξής πολύ χρήσιμη ιδιότητα

Πρόταση

Έστω $\|\cdot\|$ νόρμα πίνακα που επάγεται απο διανυσματική νόρμα. Ισχύει ότι

- $\|Ax\| \leq \|A\| \|x\|$ για κάθε x .

Το ακόλουθο θεώρημα είναι πολύ χρήσιμο,

Θεώρημα

Αν $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ η σειρά $\sum_{k=0}^{\infty} a_k A^k$ συγκλίνει αν υπάρχει μια νορμα πίνακα στον $\mathbb{C}^{n \times n}$ τέτοια ώστε η αριθμητική σειρά $\sum_{k=0}^{\infty} a_k \|A\|^k$ να συγκλίνει.

Μία πολύ σημαντική εφαρμογή του παραπάνω θεωρήματος είναι και η παρακατω προταση

Πρόταση

Ο πίνακας $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ είναι αντιστρέψιμος αν υπάρχει νορμα πίνακα $\|\cdot\|$ τέτοια ώστε $\|I - A\| \leq 1$.

Στην περίπτωση αυτή

$$A^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (I - A)^k$$

Ορισμός (Φασματική ακτίνα)

Έστω $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Η φασματική ακτίνα του A ορίζεται ως

$$\varrho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \text{ ιδιοτιμή του } A\}.$$

Πρόταση

Ισχύουν τα ακόλουθα:

- 1 Αν $\|\cdot\|$ είναι οποιαδήποτε νόρμα πίνακα ισχυει ότι

$$\varrho(A) \leq \|A\|$$

- 2 $\lim_n A^n = 0$ αν και μόνο αν $\varrho(A) < 1$.

- 3 Αν $\|\cdot\|$ είναι μια οποιαδήποτε νόρμα πίνακα τότε

$$\varrho(A) = \lim_n \|A^n\|^{1/n}.$$

Ορισμός (Ισοδύναμες νόρμες)

Δύο νόρμες (διανυσμάτων ή πινάκων) $\|\cdot\|_1, \|\cdot\|_2$, ονομάζονται ισοδύναμες αν υπάρχουν σταθερές $c_1, c_2 > 0$ τέτοιες ώστε

$$c_1\|A\|_1 \leq \|A\|_2 \leq c_2\|A\|_2, \quad \forall A \in \mathbb{M}.$$

Ευστάθεια και Conditioning

Μία απο τις χρησιμότητες των νορμών πινάκων είναι στο να ελέγξουμε την ευστάθεια των λύσεων διαφόρων αριθμητικών προβλημάτων.

Ας πάρουμε το γραμμικό σύστημα

$$Ax = b$$

Ας υποθέσουμε τώρα ότι διαταράσσουμε το δεξί μέρος (π.χ. λόγω υπολογιστικών σφαλμάτων) στο $b + \delta b$.

Αυτό θα οδηγήσει σε μια διαφορετική λύση $x + \delta x$ για το σύστημα.

Πόσο θα διαφέρουν οι 2 λύσεις;

Αυτό είναι το πρόβλημα της ευστάθειας.

Εφoσον,

$$Ax = b$$

$$A(x + \delta x) = b + \delta b,$$

αφαιρώντας και υποθέτωντας ότι A αντιστρέψιμος έχουμε ότι

$$\delta x = A^{-1} \delta b,$$

οπότε το **απόλυτο σφάλμα** θα ικανοποιεί την εκτίμηση

$$\|\delta x\| = \|A^{-1} \delta b\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta b\|.$$

Απο την άλλη ενδεχομενως να έχει μεγαλύτερο ενδιαφέρον το **σχετικό σφάλμα** δηλαδή η ποσότητα $\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}$.

Απο την $b = Ax$ έχουμε ότι

$$\|b\| = \|Ax\| \leq \|A\| \|x\| \implies \|x\| \geq \frac{1}{\|A\|} \|b\|,$$

οπότε συνδυάζοντας αυτό με την παραπάνω εκτίμηση για το απόλυτο σφάλμα έχουμε

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A^{-1}\|}{\|A\|} \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}.$$

Ορισμός (Ο αριθμός κατάστασης (condition number))

Ο λόγος

$$\kappa(A) := \frac{\|A^{-1}\|}{\|A\|},$$

ονομάζεται αριθμός κατάστασης (condition number) του πίνακα A .

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}.$$

- Αν $\kappa(A) < 1$ τότε τα αριθμητικά σφάλματα δεν μεγεθύνονται.
- Αν $\kappa(A) > 1$ τότε τα αριθμητικά σφάλματα μεγεθύνονται.

Θεώρημα συστολής του Banach

Θεώρημα

Ας υποθέσουμε ότι η $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ είναι συστολή δηλαδή υπάρχει $\varrho < 1$ τέτοιο ώστε

$$\|F(x) - F(y)\| \leq \varrho \|x - y\|, \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$

Τότε, υπάρχει κάποιο $x^* \in \mathbb{R}^n$ τέτοιο ώστε

$$x^* = F(x^*),$$

και μαλιστα μπορούμε να το προσεγγίσουμε με το επαναληπτικό σχήμα

$$x_{n+1} = F(x_n), \quad n = 1, 2, \dots,$$

υπό την έννοια ότι $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x^*$, για οποιοδήποτε αρχική επιλογή $x_1 = x \in \mathbb{R}^n$.

Όπως θα δούμε αργότερα στην δική μας περίπτωση η σύγκλιση ενός επαναληπτικού σχήματος για την επίλυση γραμμικών συστημάτων εξαρτάται από τις ιδιοτιμές του πίνακα A .

Πιο συγκεκριμένα

Θεώρημα

Το επαναληπτικό σχήμα

$$x_{n+1} = Cx_n + c, \quad n = 1, 2, \dots,$$

συγκλίνει για κάθε αρχική συνθήκη $x_1 = x$ αν και μόνο αν οι ιδιοτιμές της ικανοποιούν τη συνθήκη

$$|\lambda_n| \leq \dots \leq |\lambda_2| \leq |\lambda_1| < 1.$$

Οι διαφορετικές επαναληπτικές μέθοδοι που αναφέραμε στην αρχή αντιστοιχούν σε διαφορετικές επιλογές του πίνακα B .

Μέθοδος Jacobi

Η μέθοδος του Jacobi επιλέγει την διάσπαση

$$A = B + (A - B) = D + (R + L),$$

όπου D είναι το διαγώνιο μέρος της A και R, L τα κομμάτια επάνω και κάτω απο την διαγώνιο αντιστοίχως.



Η επιλογή αυτή μας οδηγεί στην επαναληπτική μέθοδο

$$x^{(k+1)} = -D^{-1}(L + R)x^{(k)} + D^{-1}b,$$

με

$$D^{-1} = \begin{cases} a_{ii}^{-1} & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad R = \begin{cases} a_{ij} & i < j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad L = \begin{cases} a_{ij} & i > j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

Σε μορφή συνιστωσών

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\ell=1, \ell \neq i}^n a_{i\ell} x_{\ell}^{(k)} \right), \quad 1 \leq i \leq n.$$

Επαναλαμβάνουμε την παραπάνω επανάληψη για όσες φορές χρειαστεί μέχρις ότου η ακολουθία $\{x^{(k)}\}$ να πλησιάζει στην σύγκλιση.

Αυτό γίνεται είτε ελέγχοντας το πόσο μικρές τιμές παίρνει η ποσότητα $\|b - Ax^{(k)}\|$, ή η ποσότητα $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$.

Ο αλγόριθμος του Jacobi

```

 $r = \|Ax^{(0)} - b\|$ 
while  $r > \epsilon$ 
  for  $i = 1 : n$ 
     $y_i = b_i$ 
    for  $\ell = 1 : i - 1$ 
       $y_i = y_i - a_{i\ell}x_\ell$ 
    for  $\ell = i + 1 : n$ 
       $y_i = y_i - a_{i\ell}x_\ell$ 
    end
  end
   $x_i = y_i / a_{ii}$ 
   $x = y$  % as vector
   $r = \|Ax - b\|$ 
end

```

Για να μπορούμε να υλοποιήσουμε τον αλγόριθμο του Jacobi ο διαγώνιος πίνακας D δεν πρέπει να έχει κανένα μηδενικό στοιχείο.

Θεώρημα

Ο αλγοριθμος του Jacobi συγκλίνει για οποιαδήποτε αρχική συνθήκη αν ο πίνακας A ικανοποιεί την συνθήκη

$$\sum_{\ell=1, \ell \neq i}^n |a_{i\ell}| < a_{ii}$$

(strictly diagonally dominant)

Μέθοδος Gauss-Seidel

Η μέθοδος Gauss -Seidel αντιστοιχεί σε μια διαφορετική διάσπαση του πίνακα A , χρησιμοποιώντας

$$A = B + (A - B) = (D + L) + R$$



Η επιλογή αυτή καταλήγει στον επαναληπτικό αλγόριθμο

$$x^{(k+1)} = (D + L)^{-1}(b - Rx^{(k)}).$$

με

$$D = \begin{cases} a_{ii} & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad R = \begin{cases} a_{ij} & i < j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad L = \begin{cases} a_{ij} & i > j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

Σε μορφή συνιστωσών

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\ell=1}^{i-1} a_{i\ell} x_{\ell}^{(k+1)} - \sum_{\ell=i+1}^n a_{i\ell} x_{\ell}^{(k)} \right), \quad 1 \leq i \leq n.$$

Επαναλαμβάνουμε την παραπάνω επανάληψη για όσες φορές χρειαστεί μέχρις ότου η ακολουθία $\{x^{(k)}\}$ να πλησιάζει στην σύγκλιση.

Αυτό γίνεται είτε ελέγχοντας το πόσο μικρές τιμές παίρνει η ποσότητα $\|b - Ax^{(k)}\|$, ή η ποσότητα $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$.

Ο αλγόριθμος Gauss-Seidel

```

 $r = \|Ax^{(0)} - b\|$ 
while  $r > \epsilon$ 
  for  $i = 1 : n$ 
     $x_i = b_i$ 
    for  $\ell = 1 : i - 1$ 
       $x_i = x_i - a_{i\ell}x_\ell$ 
    for  $\ell = i + 1 : n$ 
       $x_i = x_i - a_{i\ell}x_\ell$ 
    end
  end
   $x_i = x_i / a_{ii}$ 
   $r = \|Ax - b\|$ 
end

```

Ο αλγόριθμος Gauss-Seidel αποτελεί μια βελτίωση του αλγορίθμου του Jacobi

Ο αλγόριθμος αυτός συγκλίνει π.χ. στην περίπτωση όπου ο πίνακας A είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος.

Κάτω απο ορισμένες περιπτώσεις συγκλίνει πιο γρηγορα απο τον αλγοριθμο του Jacobi

Το υπολογιστικό κόστος τόσο για την μέθοδο Jacobi όσο και για την μέθοδο Gauss - Seidel είναι της τάξης $O(n^2)$.

Χαλάρωση (relaxation)

Η βασική ιδέα των μεθόδων χαλάρωσης είναι να αντικαταστήσουμε το επαναληπτικό σχήμα με το

$$x^{(k+1)} = (1 - \omega)x^{(k)} + \omega z^{(k+1)}, \quad \omega \in \mathbb{R},$$

για κατάλληλη επιλογή της διόρθωσης $z^{(k+1)}$.

Κάθε επαναληπτική μέθοδος μπορεί να τροποποιηθεί σε μέθοδο χαλάρωσης.

Η χαλάρωση μπορεί να επιταχύνει την σύγκλιση επαναληπτικών σχημάτων.

Χαλάρωση Jacobi

Ας πάρουμε την μέθοδο Jacobi και ας την εκφράσουμε

$$x^{(k+1)} = D^{-1}b - D^{-1}(R + L)x^{(k)} = x^{(k)} + D^{-1}(b - Ax^{(k)}).$$

Αυτή μπορεί να ερμηνευθεί σαν η προηγούμενη προσέγγιση της λύσης $x^{(k)}$ διορθωμένη με το υπόλοιπο $b - Ax^{(k)}$.

Αν τροποποιήσουμε την μέθοδο Jacobi ζυγίζοντας την διόρθωση διαφορετικά

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \omega D^{-1}(b - Ax^{(k)}), \quad \omega \in \mathbb{R},$$

παίρνουμε την μεθοδο Jacobi με χαλάρωση (relaxation)

Αυτό αντιστοιχεί στο να επιλέξουμε την διάσπαση $A = B + (A - B)$ με $B(\omega) = \frac{1}{\omega}D$.

Η μέθοδος χαλάρωσης του Jacobi μπορεί ισοδύναμα να γραφεί και στην μορφή

$$\begin{aligned}x^{(k+1)} &= (1 - \omega)x^{(k)} + \omega z^{(k+1)}, \\z^{(k+1)} &= Cx^{(k)} + D^{-1}b, \quad C = -D^{-1}(L + R).\end{aligned}$$

Σε μορφή συνιστωσών

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\ell=1, \ell \neq i}^n a_{i\ell} x_{\ell}^{(k)} \right), \quad 1 \leq i \leq n.$$

Επαναλαμβάνουμε την παραπάνω επανάληψη για όσες φορές χρειαστεί μεχρις ότου η ακολουθία $\{x^{(k)}\}$ να πλησιάζει στην σύγκλιση.

Η επιλογή της παραμέτρου ω μπορεί να γίνει με τρόπο ώστε να επιταχυνθεί η σύγκλιση.

Θεώρημα

Ας ορίσουμε τον πίνακα

$$\begin{aligned}C(\omega) &= (1 - \omega)I + \omega C, \\ C &= -D^{-1}(L + R).\end{aligned}$$

Αν ο πίνακας C έχει πραγματικές ιδιοτιμές $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n < 1$, η φασματική ακτίνα (spectral radius) του πίνακα $C(\omega)$ ελαχιστοποιείται για την επιλογή $\omega = \frac{2}{2 - \lambda_1 - \lambda_n}$.

Αν $\lambda_1 \neq -\lambda_n$ η μέθοδος χαλάρωσης συγκλίνει γρηγορότερα απο την μεθοδο Jacobi.

Χαλάρωση Gauss-Seidel (Successive Over Relaxation)

Η μέθοδος SOR είναι η

$$\begin{aligned}x^{(k+1)} &= (1 - \omega)x^{(k)} + \omega z^{(k+1)}, \\Dz^{(k+1)} &= b - Lx^{(k+1)} - Rx^{(k+1)}\end{aligned}$$

Αυτή μπορεί ισοδύναμα να γραφεί

$$(D + \omega L)x^{(k+1)} = [(1 - \omega)D - \omega R]x^{(k)} + \omega b$$

Σε μορφή συνιστωσών

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\ell=1}^{i-1} a_{i\ell} x_{\ell}^{(k+1)} - \sum_{\ell=i+1}^n a_{i\ell} x_{\ell}^{(k)} \right), \quad 1 \leq i \leq n.$$

Η μέθοδος δεν συγκλίνει εκτός αν $\omega \in (0, 2)$ και συγκλίνει πάντοτε για αυτές τις επιλογές αν ο A είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος.

Ο αλγόριθμος Relaxed Gauss-Seidel (SOR)

$$r = \|Ax^{(0)} - b\|$$

while $r > \epsilon$

for $i = 1 : n$

$$x_i = b_i$$

for $\ell = 1 : n$

$$x_i = x_i - a_{i\ell}x_\ell$$

end

$$x_i = x_i + \omega \frac{x_i}{a_{ii}}$$

end

$$r = \|Ax - b\|$$

end

Προβλήματα ιδιοτιμών)

Σημαντικό ρόλο σε διάφορες εφαρμογές παίζουν τα προβλήματα ιδιοτιμών δηλαδή η λύση προβλημάτων της μορφής

$$Ax = \lambda x, \quad \lambda \in \mathbb{C}, \quad x \neq 0.$$

Οι τιμές του $\lambda \in \mathbb{C}$ για τις οποίες το παραπάνω σύστημα έχει μη τετριμμένη λύση ονομάζονται ιδιοτιμές ενώ οι λύσεις του ιδιοδιανύσματα.

Εν γένει ένας πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ έχει n μιγαδικές ιδιοτιμές.

Οι ιδιοτιμές είναι οι ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

Σημαντικά προβλήματα της στατιστικής και της επιστημης δεδομένων ανάγονται σε προβλήματα ιδιοτιμών π.χ. η ανάλυση δεσπόζουσων συνιστωσών (PCA), η διάσπαση σε ιδιόμορφες τιμές (SVD) κ.α.

Η μέθοδος των δυνάμεων

Η μέθοδος αυτή είναι μια καλή και ευχρηστη μέθοδος για τον υπολογισμό της μέγιστης ιδιοτιμής ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ που έχει

α Πραγματικές ιδιοτιμες διατεταγμένες ως $|\lambda_n| \leq \dots \leq |\lambda_1|$.

β Ιδιοδιανύσματα $w_1, \dots, w_n$ που αποτελούν μια βάση του $\mathbb{R}^n$.

Η μέθοδος των δυνάμεων (power method) βασίζεται στην παρατήρηση ότι

$$\frac{\|A^{m+1}x\|}{\|A^m x\|} \rightarrow |\lambda_1|, \quad m \rightarrow \infty.$$

Επαναληπτική διαδικασία von Mises (power method)

1. Επιλέγουμε ένα διάνυσμα $y = \sum_{i=1}^n c_i w_i$ με $c_1 \neq 0$ και θέτουμε $x^{(0)} = \frac{y}{\|y\|}$.
2. Για κάθε $k \in \mathbb{N}$ θέτουμε

$$y^{(k)} = Ax^{(k-1)},$$

$$x^{(k)} = \frac{\sigma_k y^{(k)}}{\|y^{(k)}\|}, \quad \sigma_k \in \{-1, 1\}, \quad \text{τέτοιο ώστε } (x^{(k)})^T x^{(k-1)} \geq 0.$$
3. Ισχυει ότι

$$\|y^{(k)}\| \rightarrow |\lambda_1|, \quad x^{(k)} \rightarrow w_1, \quad \sigma_k \rightarrow \text{sign}(\lambda_1).$$



Αντίστροφη επανάληψη (inverse iteration method)

Η μέθοδος αντίστροφης επανάληψης (ή μέθοδος των Wielandt ή Rayleigh) είναι μια επαναληπτική μέθοδος που μας επιτρέπει να υπολογίσουμε οποιαδήποτε απλή ιδιοτιμή λ_i , ξεκινώντας από μια προσέγγιση της λ .



Σχήμα: Wielandt and Rayleigh

Η μέθοδος είναι παρόμοια στο πνεύμα με την μέθοδο των δυνάμεων αλλά προϋποθέτει σε κάθε βήμα την λύση ενός γραμμικού συστήματος.

Inverse iteration method

Έστω A συμμετρικός πίνακας και $\lambda \in \mathbb{R}$ όχι ιδιοτιμή του.

1. Για ένα οποιοδήποτε διάνυσμα $y \neq 0$, ορίζουμε $x = \frac{y}{\|y\|}$.
2. Ακολουθούμε την επαναληπτική διαδικασία

$$y^{(k)} = (A - \lambda I)^{-1} x^{(k-1)},$$

$$x^{(k)} = \frac{y^{(k)}}{\|y^{(k)}\|}.$$

3. Η ακολουθία $\lambda^{(k)} := (x^{(k)})^T A x^{(k)} \rightarrow \lambda_i$, όπου λ_i είναι η κοντινότερη ιδιοτιμή στην αρχική προσέγγιση λ .

Κάθε βήμα χρειάζεται την επίλυση του γραμμικού συστήματος

$$(A - \lambda I)y^{(k)} = x^{(k-1)},$$

η οποία μπορεί να γίνει π.χ. με την χρήση της διάσπασης LU .

Θεωρήματα localization όπως π.χ. το θεώρημα του Greshgorin μπορούν να μας δώσουν πολύ καλές a priori εκτιμήσεις των διαστημάτων που περιέχουν τις αντιστοιχες ιδιοτιμές.

Rayleigh iteration method

Έστω A συμμετρικός πίνακας και $\lambda \in \mathbb{R}$ όχι ιδιοτιμή του.

1. Για ένα οποιοδήποτε διάνυσμα $y \neq 0$, ορίζουμε $x^{(0)} = \frac{y}{\|y\|}$,
 $\lambda^{(0)} = (x^{(0)})^T A x^{(0)}$.
2. Ακολουθούμε την επαναληπτική διαδικασία

$$y^{(k)} = (A - \lambda^{(k-1)} I)^{-1} x^{(k-1)},$$

$$x^{(k)} = \frac{y^{(k)}}{\|y^{(k)}\|}$$

$$\lambda^{(k)} = (x^{(k)})^T A x^{(k)}.$$

3. Η ακολουθία $\lambda^{(k)} := (x^{(k)})^T A x^{(k)} \rightarrow \lambda_i$, όπου λ_i είναι η κοντινότερη ιδιοτιμή στην αρχική προσέγγιση λ .

Η θεωρητική θεμελίωση της μεθόδου στις ιδιότητες του πηλίκου του Rayleigh σε σχέση με τις ιδιοτιμές ενός πίνακα.

Θεώρημα

Έστω $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ συμμετρικός πίνακας και για οποιοδήποτε $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$ ορίζουμε το πηλίκο του Rayleigh

$$R(x) = \frac{x^T A x}{x^T x}.$$

Ισχύει ότι

$$\lambda_{\min}(A) \leq R(x) \leq \lambda_{\max}(A), \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0.$$

Η μέθοδος QR

Η μέθοδος QR μπορεί να υπολογίσει όλες τις ιδιοτιμές ενός πίνακα A και βασίζεται στην διάσπαση (παραγοντοποίηση) QR .

Υπενθυμίζουμε ότι ένας πίνακας A μπορεί να γραφεί ως $A = QR$ όπου Q ορθογώνιος πίνακας και R άνω τριγωνικός.

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στην κατασκευή της ακολουθίας πινάκων $A^{(k)}$ με

$$\begin{aligned} A^{(1)} &= A, \\ A^{(k+1)} &= R^{(k)} Q^{(k)}, \end{aligned}$$

όπου

$$A^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)},$$

η διάσπαση QR του πίνακα $A^{(k)}$ απο το k -βήμα.

Θεώρημα

Ας υποθέσουμε ότι ο πίνακας A έχει ιδιοτιμές $0 < |\lambda_1| < \dots < |\lambda_n|$ και ότι ο V^{-1} (όπου V ο πίνακας των ιδιοδιανυσμάτων του A) έχει διάσπαση LU .

Τότε η ακολουθία $A^{(k)}$ συγκλίνει σε ένα άνω τριγωνικό πίνακα που τα διαγώνια στοιχεία του περιέχουν τις ιδιοτιμές του A .

Η μέθοδος αυτή δεν είναι ιδιαίτερα εύχρηστη για πίνακες μεγάλης διάστασης κυρίως λόγω των αυξημένων αναγκών σε υπολογιστική μνήμη και του μεγάλου αριθμού πράξεων που χρειάζεται.

Η μέθοδος μπορεί να επιταχυνθεί σημαντικά αν ο πίνακας A είναι κοντά σε ένα άνω τριγωνικό πίνακα, δηλαδή έχει την ιδιότητα $a_{ij} = 0$ για κάθε $i > j + 1$ (πίνακας Hessenberg).

Μία συνηθισμένη παραλλαγή της μεθόδου είναι πρώτα να κάνουμε έναν μετασχηματισμό ομοιότητας Householder για να μετατρέψουμε τον πίνακα A σε μορφή Hessenberg και κατόπιν να εφαρμοσούμε την μέθοδο QR στον μετασχηματισμένο πίνακα.

Πρόταση (Μετασχηματισμός Hessenberg)

Για κάθε πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ υπάρχει ένας ορθογώνιος πίνακας P τέτοιος ώστε να είναι το γινόμενο από $n - 2$ πίνακες Householder $H_1, \dots, H_{n-2}$ και ο πίνακας $P^T A P$ να είναι πίνακας Hessenberg.

Το κόστος του μετασχηματισμού είναι $O(n^3)$ (αλλά γίνεται μόνο μια φορά στην αρχή της μεθόδου!)

Η ακολουθία των πινάκων $A^{(k)}$ που παράγεται από την μέθοδο QR αν ο αρχικός πίνακας A είναι πίνακας Hessenberg αποτελείται επίσης από πίνακες Hessenberg.

Η διάσπαση QR όμως για ένα πίνακα Hessenberg απαιτεί μόνο $O(n^2)$ πράξεις σε αντίθεση με το τι ισχύει για γενικούς πίνακες οι οποίοι απαιτούν $O(n^3)$ πράξεις!

Η μέθοδος QR για ένα πίνακα Hessenberg κάτω από υποθέσεις συγκλίνει σε ένα πίνακα Hessenberg η διαγώνιος του οποίου περιέχει τις ιδιοτιμές.

Μέθοδος QR με μετασχηματισμό σε μορφή Hessenberg

- 1 Μετασχηματίζουμε τον πίνακα A σε μορφή Hessenberg

$$A_H = P^T A P.$$

- 2 Δημιουργούμε την ακολουθία

$$\begin{aligned} A^{(1)} &= A_H, \\ Q^{(k)}, R^{(k)}, &\text{ έτσι ώστε } A^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)}, \\ A^{(k+1)} &= R^{(k)} Q^{(k)} \end{aligned}$$

- 3 Τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα $A^{(k)}$ για $k \rightarrow \infty$ αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές του πίνακα A .

Για το βήμα 1 πρέπει να χρησιμοποιήσουμε κατάλληλους μετασχηματισμούς Householder

Μέθοδος Krylov (subspace iteration))

Οι επαναληπτικές μέθοδοι που είδαμε ως τώρα χρησιμοποιούν ένα διάνυσμα x και δίνουν πληροφορία για τις ιδιοτιμές ή τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα A χρησιμοποιώντας το $A^k x$ για μεγάλο k ($k \rightarrow \infty$) αγνοώντας εντελώς τα ενδιάμεσα διανύσματα.

Οι μέθοδοι που βασίζονται στη ιδέα του subspace iteration αποσκοπούν στο να χρησιμοποιήσουν και την ενδιάμεση πληροφορία που πιθανον προσφέρεται από τα $A^i x$, $i = 0, \dots, k-1$.

Σύντομη παράκαμψη στις μεθόδους προβολής

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να προσεγγίσουμε την λύση της εξίσωσης $Ax = b$ σε καποιον συγκεκριμένο υπόχωρο $\mathcal{K}$ του $\mathbb{R}^n$, με $\dim(\mathcal{K}) = m < n$.

Αν $\bar{x}$ η προσέγγισή μας θα έχει καποιο σφάλμα το οποίο θα μπορεί να ποσοτικοποιηθεί είτε απο το υπόλοιπο $\bar{r} = b - A\bar{x}$ είτε απο το σφάλμα $\bar{d} = x^* - \bar{x}$ όπου x^* είναι η λύση του συστήματος.

Η επιλογή του χώρου $\mathcal{K}$ μπορεί να συνδέεται είτε με τις ανάγκες της προσέγγισης είτε με τις ιδιότητες του συστήματος, π.χ. αν μας ενδιαφέρουν μόνο οι πρώτες m συνιστώσες της λύσης και όχι οι υπόλοιπες $\mathcal{K} = \text{span}(e_1, \dots, e_m)$.

Πολλές φορές μας ενδιαφέρει να κρατήσουμε και μνήμη της αρχικής μας πρόβλεψης x_0 οπότε θα ψάξουμε για προσέγγιση $\bar{x}$ στον affine χώρο $x_0 + \mathcal{K}$, δηλ. $\bar{x} = x_0 + z$ με $z \in \mathcal{K}$.

Στην περίπτωση αυτή το υπόλοιπο θα γίνει $b - A\bar{x} = r_0 - Az$ όπου $r_0 = b - Ax_0$ είναι το αρχικό υπόλοιπο, και το σφάλμα θα γίνει $\bar{d} = x^* - \bar{x} = x^* - z - x_0$, οπότε δρώντας το πίνακα A απο αριστερά $A\bar{d} = b - Ax_0 - Az = r_0 - Az$,

Ας δούμε τώρα πιθανές στρατηγικές για την επιλογή του z .

Μια πιθανή στρατηγική είναι η επιλογή της διόρθωσης $z \in \mathcal{K}$ έτσι ώστε να ελαχιστοποιηθεί το υπόλοιπο

$$\bar{x} \in \arg \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}} \|Ax - b\|$$

Μία εναλλακτική στρατηγική είναι η επιλογής της διορθωσης $z \in \mathcal{K}$ έτσι ώστε να ελαχιστοποιηθεί το $x^* - x$, επιλέγοντας την ποσότητα $\langle A(x^* - x), x^* - x \rangle$ (η ποσότητα αυτή είναι ένα εσωτερικό γινόμενο αν ο A είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος).

Επιλογή του $z \in \mathcal{K}$ ελαχιστοποιώντας το σφάλμα $\langle A(x - x^*), x - x^* \rangle$, $x = x_0 + z$

Ας υποθέσουμε ότι $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος.

Ας πάρουμε την συνάρτηση

$$z \mapsto \langle A(x^* - x_0 - z), x^* - x_0 - z \rangle = \langle r_0 - Az, (x^* - x_0) - z \rangle =: F(z), \quad z \in \mathcal{K}.$$

Ας υποθέσουμε ότι $\bar{z} \in \mathcal{K}$ είναι το διάνυσμα του υποχώρου $\mathcal{K}$ στο οποίο επιτυγχάνεται το ελάχιστο για την F (οπότε $\bar{x} = x_0 + \bar{z} \in x_0 + \mathcal{K}$ είναι η ζητούμενη προσέγγιση).

Απο τις ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου

$$\begin{aligned} \frac{1}{\epsilon}(F(\bar{z} + \epsilon z) - F(\bar{z})) &= \langle Az, (x^* - x_0) - \bar{z} \rangle - \langle z, r_0 - A\bar{z} \rangle + O(\epsilon) \\ &= -\langle z, A[(x^* - x_0) - \bar{z}] \rangle - \langle z, r_0 - A\bar{z} \rangle + O(\epsilon) \\ &= -2\langle r_0 - A\bar{z}, z \rangle + O(\epsilon), \quad \forall z \in \mathcal{K}. \end{aligned}$$

Εφόσον το $\bar{z} \in \mathcal{K}$ είναι ελάχιστο έχουμε ότι

$$0 \leq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} (F(\bar{z} + \epsilon z) - F(\bar{z})) = -2 \langle r_0 - A\bar{z}, z \rangle \quad \forall z \in \mathcal{K}$$

και επειδή το $\mathcal{K}$ είναι υπόχωρος αν $z \in \mathcal{K}$ ισχύει και $-z \in \mathcal{K}$, οπότε θα πρέπει

$$\langle r_0 - A\bar{z}, z \rangle = 0 \quad \forall z \in \mathcal{K}$$

Συνεπώς το διάνυσμα $r_0 - A\bar{z}$ θα είναι κάθετο σε όλα τα διανύσματα του $\mathcal{K}$, άρα

$$r_0 - A\bar{z} \in \mathcal{K}^\perp \quad \text{ή ισοδύναμα} \quad r_0 - A\bar{z} \perp \mathcal{K}.$$

Η επιλογή λοιπόν του $\bar{x}$ σύμφωνα με το προτεινόμενο σχήμα θα είναι ως εξής

$$\bar{x} = x_0 + \bar{z} \in \arg \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}} \langle A(x^* - x), x^* - x \rangle = \arg \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}} \|x^* - x\|_A^2$$

ή ισοδύναμα

$$\bar{x} = x_0 + \bar{z} \in x_0 + \mathcal{K},$$

$$r_0 - A\bar{z} \perp \mathcal{L}, \quad \text{ή ισοδύναμα} \quad r - A\bar{z} \in \mathcal{L}^\perp \quad \text{με} \quad \mathcal{L} = \mathcal{K}$$

Επιλογή του $z \in \mathcal{K}$ ελαχιστοποιώντας το σφάλμα $\|b - Ax\|$, για $x = x_0 + z$

Ας υποθέσουμε ένα οποιοδήποτε τετραγωνικό πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Ας πάρουμε την συνάρτηση

$$z \mapsto \|b - A(x_0 + z)\|^2 = \langle b - A(x_0 + z), b - A(x_0 + z) \rangle = \langle r_0 - Az, r_0 - Az \rangle =: G(z), \quad z \in \mathcal{K}$$

Ας υποθέσουμε ότι $\bar{z} \in \mathcal{K}$ είναι το διάνυσμα του υποχώρου $\mathcal{K}$ στο οποίο επιτυγχάνεται το ελάχιστο για την F (οπότε $\bar{x} = x_0 + \bar{z} \in x_0 + \mathcal{K}$ είναι η ζητούμενο προσέγγιση).

Απο τις ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου

$$\frac{1}{\epsilon} (G(\bar{z} + \epsilon z) - G(\bar{z})) = -2 \langle r_0 - A\bar{z}, Az \rangle + O(\epsilon),$$

Επειδή το $\bar{z}$ αντιστοιχεί στο ελάχιστο

$$0 \leq \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} (G(\bar{z} + \epsilon z) - G(\bar{z})) = -2 \langle r_0 - A\bar{z}, Az \rangle, \quad \forall z \in \mathcal{K}$$

Εφόσον το $\mathcal{K}$ είναι υπόχωρος αν $z \in \mathcal{K}$ ισχύει και $-z \in \mathcal{K}$, οπότε θα πρέπει

$$\langle r_0 - A\bar{z}, Az \rangle = 0 \quad \forall z \in \mathcal{K}$$

Αυτό είναι ισοδύναμο με το να πούμε ότι

$$\langle r_0 - A\bar{z}, y \rangle = 0, \quad \forall y \in A\mathcal{K}, \quad \text{ή} \quad r_0 - A\bar{z} \perp A\mathcal{K}. \quad \text{ή} \quad r_0 - A\bar{z} \in (A\mathcal{K})^\perp.$$

Η επιλογή λοιπόν του $\bar{x}$ σύμφωνα με το προτεινόμενο σχήμα θα είναι ως εξής

$$\bar{x} = x_0 + \bar{z} \in \arg \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}} \langle b - A, b - Ax \rangle = \arg \min_{x \in x_0 + \mathcal{K}} \|b - Ax\|^2$$

ή ισοδύναμα

$$\bar{x} = x_0 + \bar{z} \in x_0 + \mathcal{K},$$

$$r_0 - A\bar{z} \perp \mathcal{L}, \quad \text{ή ισοδύναμα} \quad r - A\bar{z} \in \mathcal{L}^\perp \quad \text{με} \quad \mathcal{L} = A\mathcal{K}.$$

Ξεκινώντας λοιπόν απο τα 2 αυτά απτά παραδείγματα θα δώσουμε ένα γενικό ορισμό μιας μεθόδου προβολής

Ορισμός

Έστω $\mathcal{K}$, $\mathcal{L}$ δυο υπόχωροι του $\mathbb{R}^n$ διάστασης $m \leq n$.

Μια μέθοδος προβολής για την επίλυση του γραμμικού συστήματος $Ax = b$ προσεγγίζοντας την λύση με το $\bar{x} \in x_0 + \mathcal{K}$, είναι μια προσέγγιση της μορφής

$$\bar{x} = x_0 + \bar{z} \in x_0 + \mathcal{K},$$

$$r_0 - A\bar{z} \perp \mathcal{L} \quad \text{ή} \quad r_0 - A\bar{z} \in \mathcal{L}^\perp,$$

όπου x_0 η αρχική προσέγγιση και $r_0 = b - Ax_0$ το αρχικό υπόλοιπο.

Η επιλογή των υποχώρων $\mathcal{K}$ και $\mathcal{L}$ μπορεί να γίνει με όποιο τρόπο επιθυμούμε.

- $\mathcal{K} = \mathcal{L}$ μέθοδος ορθογώνιας προβολής
- $\mathcal{K} \neq \mathcal{L}$ μεθοδος μη ορθογώνιας προβολής.

Τυπικά το παραπάνω βήμα είναι το k -οστό βήμα σε μια επαναληπτική μέθοδο, και μπορεί οι υπόχωροι $\mathcal{K}$ και $\mathcal{L}$ να αλλάζουν απο βήμα σε βήμα

Παράδειγμα

Αν, για οποιοδήποτε $\mathcal{K}$, επιλέξουμε $\mathcal{L} = \mathcal{K}$ η μέθοδος προβολής που προκύπτει είναι ισοδύναμη με το να ανανεώνουμε την προσέγγιση μας κάθε φορά επιλέγοντας αυτή την προσέγγιση $\bar{x} \in x_0 + \mathcal{K}$ που ελαχιστοποιεί το σφάλμα $\|x^* - x\|_A^2 = \langle A(x^* - x), x^* - x \rangle$.

Παράδειγμα

Αν, για οποιοδήποτε $\mathcal{K}$, επιλέξουμε $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$, η μέθοδος προβολής που προκύπτει είναι ισοδύναμη με το να ανανεώνουμε την προσέγγιση μας κάθε φορά επιλέγοντας αυτή την προσέγγιση $\bar{x} \in x_0 + \mathcal{K}$ που ελαχιστοποιεί το σφάλμα $\|b - Ax\|^2 = \langle b - Ax, b - Ax \rangle$.

Ο ρόλος μιας βάσης για τους υπόχωρους $\mathcal{K}$ και $\mathcal{L}$

Η επιλογή του στοιχείου $\bar{z}$ διευκολύνεται αν είναι γνωστή μια βάση για τους υπόχωρους $\mathcal{K}$ και $\mathcal{L}$.

Έστω $V = [v_1, \dots, v_m]$ ο πίνακας που έχει στήλες μια βάση $\{v_1, \dots, v_m\}$ του $\mathcal{K}$.

Έστω $W = [w_1, \dots, w_m]$ ο πίνακας που έχει στήλες μια βάση $\{w_1, \dots, w_m\}$ του $\mathcal{L}$.

Το οποιοδήποτε διάνυσμα $\bar{z} \in \mathcal{K}$ μπορεί να γραφεί ως $\bar{z} = Vy$, για $y \in \mathbb{R}^m$.

Άρα, το $\bar{x} \in x_0 + \mathcal{K}$ θα είναι γενικά της μορφής $\bar{x} = x_0 + Vy$, για $y \in \mathbb{R}^m$.

Απο την άλλη πλευρά θα πρέπει $r_0 - A\bar{z} \perp \mathcal{L}$ δηλ.

$$\langle r_0 - A\bar{z}, w \rangle = 0, \quad \forall w \in \mathcal{L},$$

και εκφράζοντας το οποιοδήποτε $w \in \mathcal{L}$ ως $w = Wy'$ για $y' \in \mathbb{R}^m$ η παραπάνω συνθήκη γίνεται

$$\langle r_0 - AVy, Wy' \rangle = 0, \quad \forall y' \in \mathbb{R}^m,$$

το οποίο δίνει ισοδύναμα

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

Η λύση του παραπάνω προβλήματος $\bar{y} \in \mathbb{R}^m$ μας επιτρέπει να εκφράσουμε το

$$\bar{x} = x_0 + V\bar{y}, \quad \bar{y} \in x_0 + \mathcal{K}.$$

Αν ο πίνακας $W^T AV$ είναι μη ιδιόμορφος τότε

$$\bar{x} = x_0 + V \left[(W^T AV)^{-1} W^T r_0 \right] \in x_0 + \mathcal{K}.$$

Μια εύλογη ερώτηση είναι

Πότε το σύστημα $W^T A V y = W^T r_0$ έχει λύση ή πότε ο πίνακας $W^T A V$ είναι μη ιδιόμορφος;

Πρόταση

- 1 Αν A συμμετρικός και θετικά ορισμένος και $\mathcal{L} = \mathcal{K}$ τότε για οποιαδήποτε βάση V, W των $\mathcal{K}, \mathcal{L}$, ο πίνακας $W^T A V$ είναι μη ιδιόμορφος.
- 2 Αν A μη ιδιόμορφος και $\mathcal{L} = A\mathcal{K}$ τότε για οποιαδήποτε βάση V, W των $\mathcal{K}, \mathcal{L}$, ο πίνακας $W^T A V$ είναι μη ιδιόμορφος.

Στις μεθόδους προβολής, η επιλογή των $\mathcal{K}, \mathcal{L}$ όσο και της βάσης των, μπορεί να παίζει πολύ σημαντικό ρόλο.

Στην πράξη οι μέθοδοι προβολής χρησιμοποιούνται ως επαναληπτικές μέθοδοι, για την κατασκευή μιας ακολουθίας προσεγγίσεων $\{x_k\}$ της μορφής

$$x_k = x_0 + \bar{z}_k \in x_0 + \mathcal{K}_k, \\ r_0 - A\bar{z}_k \perp \mathcal{L}_k \text{ ή } r_0 - A\bar{z}_k \in \mathcal{L}_k^\perp,$$

όπου x_0 η αρχική προσέγγιση, $r_0 = b - Ax_0$ το αρχικό υπόλοιπο και οι υπόχωροι $\mathcal{K}_k, \mathcal{L}_k$ μπορεί να αλλάζουν απο βήμα σε βήμα.

Οι μεθοδοι Krylov συνδέονται με την επιλογή των υποχώρων $\mathcal{K}_k$ της μορφής

$$\mathcal{K}^k(x, A) = \text{span}(x, Ax, \dots, A^{k-1}x), \quad x \in \mathbb{R}^n \text{ (υπόχωροι Krylov)}$$

για κατάλληλα επιλεγμένο x (συνήθως $x = r_0$).

Αυτό είναι ισοδύναμο με το να πούμε ότι προσπαθούμε να προσεγγίσουμε το

$$A^{-1}b \simeq x_k = x_0 + q_{k-1}(A)r_0,$$

όπου q_{k-1} ένα πολυώνυμο βαθμού $q-1$

Στις μεθόδους Krylov η επιλογή του $\mathcal{L}_k$ παραμένει ελεύθερη, ορίζοντας έτσι μια μεγάλη οικογένεια τέτοιων μεθόδων.

Οι δύο βασικές επιλογές είναι

- $\mathcal{L}_k = \mathcal{K}^k(r_0, A)$
- $\mathcal{L}_k = A\mathcal{K}^k(r_0, A)$ (ελάχιστοποίηση του υπολοίπου) που συνδέεται με τον υπόχωρο Krylov $\mathcal{K}^k(r_0, A^T)$.

Επίσης μπορεί κανείς να σχεδιάσει μεθόδους Krylov για διαφορετικές επιλογές του $\mathcal{K}^k$ όπως π.χ.

- $\mathcal{K}_k = A\mathcal{K}^k(r_0, A)$
- $\mathcal{K}_k = \mathcal{K}^k(r_0, A^T)$, ή $\mathcal{K}^k = \mathcal{K}^k(r_0, A^*)$

με αντίστοιχες επιλογές για τους χώρους $\mathcal{L}_k$.

Γιατί να επιλέξουμε $\mathcal{K}^k = \text{span}(r_0, Ar_0, \dots, A^{k-1}r_0)$;

Για να δώσουμε το κίνητρο για τις μεθόδους αυτές ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να λύσουμε το σύστημα $Ax = b$ με μια επαναληπτική διαδικασία, που δημιουργεί την ακολουθία προσεγγίσεων $\{x_m\}$ ξεκινώντας από μια αρχική επιλογή x_0 , και συγκλίνει στην λύση x^* .

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να παράγουμε την ακολουθία

$$x_m \in x_0 + S_m, \text{ δηλ. } x_m = x_0 + z_m, \quad z_m \in S_m$$

όπου S_m κατάλληλος υπόχωρος του $\mathbb{C}^n$.

Ένας τρόπος επιλογής της ακολουθίας x_m είναι λαμβάνοντας υπόψη την συμπεριφορά των υπολοίπων $r_m = b - Ax_m$.

$$r_m = b - Ax_m = b - A(x_0 + z_m) = r_0 - Az_m \in r_0 + AS_m$$

Μπορούμε π.χ. να επιλέξουμε την r_m έτσι ώστε να είναι το στοιχείο ελαχιστης νόρμας στον υπόχωρο $r_0 + AS_m$, ή να το διαλέξουμε ορθογώνιο σε καποιον κατάλληλο m -διάστατο υπόχωρο (Petrov-Galerkin).

Αν οι υπόχωροι S_m επιλεγούν έτσι ώστε

$$S_1 \subset S_2 \subset \cdots \subset S_m \subset S_{m+1} \subset \cdots$$

με το AS_m να είναι όσο το δυνατότερο μεγαλύτερος χώρος (δηλ. όσο πιο κοντά γίνεται στον $\mathbb{C}^n$ τόσο πιο επιτυχής θα είναι η διαδικασία ελαχιστοποίησης του υπολοίπου).

Επίσης, δεδομένου ότι ιδανικά θα θέλαμε το r_m να συγκλίνει σε κάτι σταθερό (ιδανικά στο 0 αλλά αυτό στην πράξη δεν γίνεται ποτέ), και κάθε φορά $r_m \in r_0 + AS_m$ (δηλ. ανήκει σε διαφορετικό υπόχωρο) θα βοηθούσε αν κάποια στιγμή οι υπόχωροι AS_k , δεν αλλάζουν με το k δηλ. $AS_k = AS_{k+1} = \cdots$.

Απο το επαναληπτικό σχήμα

$$r_m \in r_0 + AS_m,$$

έχουμε ότι αν ορίσουμε

$$S_1 := \text{span}(r_0),$$

τότε

$$r_1 \in r_0 + AS_1 \subset \text{span}(r_0, Ar_0) =: S_2,$$

$$r_2 \in r_0 + AS_2 \subset \text{span}(r_0, Ar_0, A^2 r_0) =: S_3$$

...

$$r_m \in r_0 + AS_m \subset \text{span}(r_0, Ar_0, A^2 r_0, \dots, A^m r_0) =: S_{m+1},$$

...

Η ακολουθία υποχώρων με γενικό όρο $S_m = \text{span}(r_0, Ar_0, \dots, A^{m-1} r_0)$ θα μπορούσε λοιπόν να είναι μια επιλογή, **αλλά όχι και η μοναδική!**

Απο το επαναληπτικό σχήμα

$$x_m \in x_0 + S_m, \text{ δηλ. } x_m = x_0 + z_m, \quad z_m \in S_m,$$

είναι προφανές ότι αν είχαμε μια βάση για τον υπόχωρο S_m με την χρήση της βάσης αυτής θα μπορούσαμε να κατασκευάσουμε οποιοδήποτε διάνυσμα του S_m , οπότε θα μπορούσαμε και να επιλέξουμε πιο εύκολα το z_m έτσι ώστε να οδηγεί σε μια 'βέλτιση' επανάληπτική διαδικασία που να προσεγγίζει όσο το δυνατόν καλύτερα γίνεται το x^* .

Συνεπώς, μία απο τις προτεραιότητες είναι η κατασκευή μιας βάσης για έναν υπόχωρο S_m (όπως θα δούμε σύντομα των υποχώρων Krylov).

Οι υπόχωροι Krylov $S_m = \text{span}(x, Ax, \dots, A^{m-1}x)$

Ορισμός (Υπόχωρος Krylov)

Αν A είναι ένας πίνακας $n \times n$, x ένα διάνυσμα, και m ένας φυσικός αριθμός, η ακολουθία $\{x, Ax, \dots, A^{m-1}x\}$ ονομάζεται ακολουθία Krylov.

Ο πίνακας $K^m(x, A) := [x, Ax, \dots, A^{m-1}x] \in \mathbb{C}^{n \times m}$ ονομάζεται πίνακας Krylov

Ο υπόχωρος $\mathcal{K}^m(x, A) := \text{span}\{x, Ax, \dots, A^{m-1}x\} = \text{Rg}(K^m(x, A)) \subset \mathbb{C}^n$ ονομάζεται υπόχωρος Krylov



Alexey Nikolayevich Krylov

Ας πάρουμε ένα πίνακα $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ και ένα οποιοδήποτε $x \in \mathbb{C}^n$, $x \neq 0$.

Παράγουμε τα διανύσματα $x, Ax, A^2x, \dots \in \mathbb{C}^n$.

Θα υπάρχει ένας μοναδικός αριθμός $1 \leq d \leq n$ τέτοιος ώστε τα διανύσματα $x, Ax, \dots, A^{d-1}x$ να είναι γραμμικά ανεξάρτητα, οπότε (από τον ορισμό του αριθμού αυτού) τα διανύσματα $x, Ax, \dots, A^{d-1}x, A^d x$ θα είναι γραμμικά εξαρτημένα.

Ο αριθμός d ονομάζεται ο βαθμός (grade) του x ως προς τον πίνακα A .

Απο την παραπάνω κατασκευή θα υπάρχουν $a_0, \dots, a_{d-1} \in \mathbb{C}$ τέτοια ώστε

$$A^d x = \sum_{k=0}^{d-1} a_k A^k x$$

οπότε ορίζοντας το πολυώνυμο $p(\lambda) = \lambda^d - \sum_{k=0}^{d-1} a_k \lambda^k$ καταλήγουμε ότι $p(A)x = 0$.

Το πολυώνυμο $p(A)$ ονομάζεται το ελάχιστικό (minimal) πολυώνυμο του x ως προς το A .

Το παραπάνω μπορούμε να το γράψουμε και ως εξής

$$A^d x \in S_d = \text{span}\{x, Ax, \dots, A^{d-1}x\}, \text{ και } AS_d \subset S_d,$$

δηλ. ο γραμμικός υπόχωρος S_d είναι **αμετάβλητος** ως προς τον μετασχηματισμό A .

Κατά συνέπεια θα έχουμε και ότι

$$A^{d+i}x \in \text{span}\{x, Ax, \dots, A^{d-1}x\} \text{ και } A^i S_d \subset S_d \text{ για κάθε } i \geq 0$$

Αν λοιπόν ορίσουμε τους υπόχωρους (αλλάζοντας λίγο τον συμβολισμό)

$$\mathcal{K}^m(x, A) := \text{span}\{x, Ax, \dots, A^{m-1}x\}$$

θα ισχύει ότι θα έχουμε την αυξουσα ακολουθία υποχώρων

$$\mathcal{K}^1(x, A) \subsetneq \mathcal{K}^2(x, A) \subsetneq \dots \subsetneq \mathcal{K}^{d-1}(x, A) \subsetneq \mathcal{K}^d(x, A) = \mathcal{K}^{d+1}(x, A) = \dots \subset \mathbb{C}^n,$$

η οποία μετά τον όρο $\mathcal{K}^d(x, A)$ θα γίνεται **αμετάβλητη** κάτω απο την δράση του A δηλ.

$$A\mathcal{K}^d(x, A) \subset \mathcal{K}^d(x, A).$$

Συνοψίζοντας:

- Ισχύει ότι

$$\dim \mathcal{K}^m(x, A) = \begin{cases} m & \text{αν } m \leq d \\ d & \text{αν } m \geq d \end{cases}$$

- Ο $\mathcal{K}^d(x, A)$ είναι ο **μικρότερος** υπόχωρος που είναι αμετάβλητος ως προς την δράση του A που περιέχει το x .
- Μπορεί $A\mathcal{K}^d(x, A) \subsetneq \mathcal{K}^d(x, A)$ ή ακόμα $A\mathcal{K}^d(x, A) = \mathcal{K}^d(x, A)$.
- Αν ο A είναι μη ιδιόμορφος τότε $A\mathcal{K}^d(x, A) = \mathcal{K}^d(x, A)$ και

$$d = \min\{m \mid A^{-1}x \in \mathcal{K}^m(x, A)\}$$

- Αν $A\mathcal{K}^d(x, A) = \mathcal{K}^d(x, A)$ τότε $x \in \text{Range}(A)$ (δηλ. το σύστημα $Az = x$ έχει λύση).

Σημαντική είναι και η ακόλουθη παρατήρηση:

Αν x^* είναι η λύση του $Ax = b$, x_0 μια αρχική εκτίμηση της λύσης και $r_0 := b - Ax_0$ το υπόλοιπο και $d_0 = d(r_0, A)$ τότε $x^* \in x_0 + \mathcal{K}^{d_0}(r_0, A)$.

Δεδομένου ότι το d_0 δεν το γνωρίζουμε εκ των προτέρων, η παρατήρηση αυτή μας δίνει μια ιδέα σχετικά με την κατασκευή μιας επαναληπτικής μεθόδου που θα προσεγγίζει την λύση.

Η ακολουθία αυτή θα έχει την γενική μορφή

$$x_m \in x_0 + \mathcal{K}^m(r_0, A)$$

και η γνώση της βάσης του υπόχωρου Krylov $\mathcal{K}^m(r_0, A)$ είναι σημαντική για την επιλογή της ανανέωσης (update) $z_n \in \mathcal{K}^m(r_0, A)$.

Πως θα γίνει η παραπάνω επιλογή;

Μέθοδοι Krylov

Ορισμός

Μία μέθοδος Krylov για την επίλυση του συστήματος $Ax = b$ είναι μια ακολουθία $\{x_m\}$ και μια ακολουθία υπολοίπων $r_m := b - Ax_m$ τέτοια ώστε

$$\begin{aligned} x_m &\in x_0 + \mathcal{K}^m(r_0, A), \\ r_m = b - Ax_m &\in r_0 + A\mathcal{K}^m(r_0, A) \subset \mathcal{K}^{m+1}(r_0, A), \end{aligned}$$

ή ισοδυναμα

$$\begin{aligned} x_m - x_0 &= q_{m-1}(A)r_0 \in \mathcal{K}^m(r_0, A), \\ r_m = p_m(A)r_0 &\in r_0 + A\mathcal{K}^m(r_0, A) \subset \mathcal{K}^{m+1}(r_0, A), \end{aligned}$$

όπου q_{m-1} και p_m κατάλληλα πολυώνυμα τάξης το πολύ $m-1$ και m αντίστοιχα. Τα πολυώνυμα q_{m-1} και p_m συνδέονται με την σχέση

$$p_m(s) = 1 - sq_{m-1}(s),$$

και $p_m(0) = 1$.

Preconditioning

Πολλές φορές όταν μια μέθοδος Krylov εφαρμοστεί σε συστήματα μεγάλης διάστασης, η σύγκλιση μπορεί να είναι πολύ αργή.

Για τον λόγο αυτό αντί να επιλύσουμε το σύστημα $Ax = b$ επιλέγουμε να επιλύσουμε το σύστημα

- $(CA)x = (Cb)$ για κατάλληλη επιλογή του πίνακα C (left preconditioning)
- $(AC)(C^{-1}x) = b$ για κατάλληλη επιλογή του πίνακα C (right preconditioning)
- $(C_LAC_R)(C_R^{-1}x) = C_Lb$ για κατάλληλη επιλογή των πινάκων C_L, C_R (split preconditioning)

Κατόπιν η μέθοδος Krylov εφαρμόζεται στο σύστημα $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$, με

- $\hat{A} = CA, \hat{x} = x, \hat{b} = Cb$ (left preconditioning)
- $\hat{A} = AC, \hat{x} = C^{-1}x, \hat{b} = b$ (right preconditioning)
- $\hat{A} = C_LAC_R, \hat{x} = C_R^{-1}x, \hat{b} = C_Lb$ (split preconditioning)

Οι υπόχωροι Krylov έχουν τις εξής ιδιότητες

- 1 $\mathcal{K}^m(\lambda x, \mu A) = \mathcal{K}^m(x, A)$, $\lambda, \mu \neq 0$.
- 2 $\mathcal{K}^m(x, A - \sigma I) = \mathcal{K}^m(x, A)$.
- 3 Αν U πίνακας τέτοιος ώστε $UU^* = I$ τότε
 $U\mathcal{K}^m(U^*x, UAU^*) = \mathcal{K}^m(x, A)$ και $\mathcal{K}^m(x, A) = U\mathcal{K}^m(U^*x, UAU^*)$

Η διάσταση του υπόχωρου Krylov μπορεί να αποκαλύψει πολύτιμες πληροφορίες για την φασματική ανάλυση του πίνακα A .

Βασικές μέθοδοι Krylov

Ανάλογα με την επιλογή του χώρου S_m μπορούμε να πάρουμε διαφορετικές μεθόδους Krylov

- Conjugate gradient: A Hermitean και θετικά ορισμένος, $\mathcal{K}_k = \mathcal{L}_k = \mathcal{K}^k(r_0, A)$.
- SYMMLQ: A Hermitean και μη ιδιόμορφος, $\mathcal{K}_k = A\mathcal{K}^k(r_0, A)$, $\mathcal{L}_k = A^{-1}\mathcal{K}_k$.
- MINRES: A μη ιδιόμορφος και $\mathcal{K}_k = \mathcal{K}^k(r_0, A)$, $\mathcal{L}_k = A\mathcal{K}_k$.

Μέθοδοι κατασκευής ορθοκανονικών βάσεων στους υπόχωρους Krylov

Πριν προχωρήσουμε με τις επαναληπτικές μεθόδους με την χρήση των υποχώρων Krylov θα συζητήσουμε σχετικά με 2 μεθόδους που συνδέονται με την κατασκευή ορθοκανονικών βάσεων σε αυτούς.

Όπως είδαμε αυτο είναι απαραίτητο για να μπορέσουμε να εφαρμόσουμε στην πράξη την επαναληπτική μέθοδο.

Οι 2 βασικές μέθοδοι κατασκευής ορθοκανονικής βάσης είναι

- Η μέθοδος του Arnoldi
- Η μέθοδος του Lanczos

Κατασκευή ορθοκανονικής βάσης για τον υπόχωρο Krylov $\mathcal{K}^m(x, A)$: 1. Η μέθοδος Arnoldi

- Ξεκινάμε με ένα διάνυσμα $v_1 = \frac{x}{\|x\|}$.
- Το επόμενο διάνυσμα θα είναι το $w_2 = Av_1 - h_{11}v_1$, για κατάλληλη επιλογή του h_{11} (το οποίο θα κάνει το $w_2 \perp v_1$), και θα επιλεξουμε το v_2 κανονικοποιημένο δηλ.

$$h_{21}v_2 = Ax - h_{11}v_1$$

- Στο επόμενο βήμα θα χρησιμοποιήσουμε το Av_2 (αντι του A^2x) και θα κατασκευάσουμε ένα v_3 όπως στο βήμα 2, καθετο στα v_1, v_2 ,

$$h_{32}v_3 = Av_2 - h_{22}v_2 - h_{12}v_1$$

επιλέγοντας κατάλληλα τα βάρη h_{32}, h_{22}, h_{12} .

- Το γενικό βήμα j του αλγορίθμου θα είναι να χρησιμοποιήσουμε το Av_j (αντί του A^jx) για να κατασκευάσουμε το

$$h_{j+1,j}v_{j+1} = Av_j - \sum_{k=1}^j h_{kj}v_k, \quad 1 \leq j \leq m.$$

- Εύκολα βλέπουμε ότι $h_{ij} = \langle x_i, Ax_j \rangle$, $i = 1, \dots, j$, και $h_{j+1,j} = \|Av_j - \sum_{k=1}^j h_{kj}v_k\|$

Συνοψίζοντας, η διαδικασία Arnoldi αντιστοιχεί στην εξής επιλογή των h_{ij} .

- Έστω ότι στο βήμα j έχουμε τα ορθοκανονικά διανύσματα $v_1, \dots, v_j$.
- Επιλέγουμε

$$h_{ij} = \langle v_i, Av_j \rangle = v_i^* Av_j, \quad i = 1, \dots, j,$$

$$w_{j+1} = Av_j - \sum_{i=1}^j h_{ij} v_i,$$

$$h_{j+1,j} = \|w_{j+1}\|,$$

αν $h_{j+1,j} = 0$, η διαδικασία σταματά

$$\text{αλλιώς } v_{j+1} = \frac{1}{h_{j+1,j}} w_{j+1}.$$

Αν $Av_j \notin \text{span}(v_1, \dots, v_j)$, τότε $w_{j+1} \neq 0$, αν όχι τότε $Av_j \in \text{span}(v_1, \dots, v_j)$ οπότε $\text{span}(v_1, \dots, v_j) = \mathcal{K}^j(x, A)$ και ο υπόχωρος $\mathcal{K}^j(x, A)$ είναι αμετάβλητος κάτω από την δράση του A .

Στην πράξη επειδή λόγω αριθμητικών σφαλμάτων μπορεί η ορθογωνιότητα να γίνεται χειρότερη καθώς προχωρούν τα βήματα μπορεί να επαναλάβουμε το βήμα της ορθογωνιοποίησης δύο φορές δηλ.

Ο αλγόριθμος του Arnoldi μπορεί να γραφεί και σε μορφή πινάκων.

Ας πάρουμε τον πίνακα $V_n = [v_1, \dots, v_m]$ που περιέχει τα ορθοκανονικά δισυνύσματα βάσης $\{v_1, \dots, v_m\}$, και ας πάρουμε τον πίνακα Hessenberg που περιέχει τους συντελεστές h_{ij} (ανα στήλη),

$$H_m = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1,m} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2,m} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & h_{m,m-1} & h_{m,m} \end{bmatrix}, \quad \bar{H}_m = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1,m} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2,m} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & h_{m,m-1} & h_{m,m} \\ 0 & 0 & 0 & h_{m+1,m} \end{bmatrix}$$

Μετά απο m επαναλήψεις του αλγορίθμου έχουμε

$$AV_m = V_m H_{m,m} + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T = V_{m+1} \bar{H}_m, \quad m = 1, 2, \dots,$$

όπου e_m η m -οστή στήλη του I_n και

$$\begin{aligned} V_m^* V_m &= I_m, \quad V_m^* v_{m+1} = 0, \\ V_m^* A V_m &= H_m. \end{aligned}$$

Στην d επανάληψη $h_{d,d} = 0$

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * & | & * \\ * & * & * & | & * \\ * & * & * & | & * \\ * & * & * & | & * \\ * & * & * & | & * \\ * & * & * & | & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ \hline 0 & 0 & * \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix}$$

Τα ακόλουθα μπορεί να αποδειχθούν μαθηματικά για την μέθοδο Arnoldi

- Αν ο αλγόριθμος δεν σταματήσει πριν το m -βήμα τα διανύσματα $[v_1, \dots, v_m]$ που έχει παράγει είναι μια ορθοκανονική βάση του υπόχωρου Krylov $\mathcal{K}^m(v_1, A) = \text{span}(v_1, Av_1, \dots, A^{m-1}v_1)$.
- Ο αλγόριθμος θα σταματήσει στο βήμα j ($h_{j+1,j} = 0$) αν και μόνο αν το ελαχιστικό πολυώνυμο του v_1 είναι τάξης j (δηλ. $d = j$), και τότε ο $\mathcal{K}^j(v_1, A)$ θα είναι αμετάβλητος κάτω από τη δράση του A .

Η διαδικασία του Lanczos

Η διαδικασία του Lanczos είναι η διαδικασία του Arnoldi στην ειδική περίπτωση όπου $A = A^*$, δηλ. A Hermitean (ή συμμετρικός αν A πραγματικός).

Η απλοποίηση πηγάζει απο την παρατήρηση οτι αν εφαρμοσουμε την μέθοδο του Arnoldi σε ένα πραγματικό συμμετρικό πίνακα τότε οι συντελεστές h_{ij} που παράγει ο αλγόριθμος ικανοποιούν τα

$$\begin{aligned} h_{ij} &= 0, \quad \text{για } 1 \leq i < j - 1, \\ h_{j,j+1} &= h_{j+1,j}, \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned}$$

δηλαδή ο πίνακας $H_m = V_m^T A V_m$ είναι τριδιαγώνιος και συμμετρικός.

Χρησιμοποιούμε λοιπόν τον απλούστερο συμβολισμό

$$a_j = h_{jj}, \quad b_j = h_{j-1,j}$$

και

$$T_m = H_m = \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{m-1} & a_{m-1} & b_m \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b_m & a_m \end{bmatrix}$$

Ο αλγόριθμος Lanczos

- 1 $v_1 = v_1 / \|v_1\|$, $b_1 = 0$, $v_0 = 0$.
- 2 for $i = 1 : m$
- 3 $w_i = Av_i - b_i v_{i-1}$
- 4 $a_i = (w_i, v_i)$
- 5 $w_j = w_j - a_j v_j$
- 6 $b_{j+1} = \|w_j\|$, if $b_{j+1} = 0$ stop
- 7 $v_{j+1} = w_j / b_{j+1}$
- 8 end

Μέθοδοι Krylov επίλυσης εξισώσεων της μορφής $Ax = b$

Θα συνδυάσουμε τώρα τις μεθόδους κατασκευής ορθοκανονικών βάσεων (Arnoldi και Krylov) με την ιδέα των μεθόδων προβολής έτσι ώστε να επιλυσουμε γραμμικές εξισώσεις την μορφής $Ax = b$.

Υπενθυμίζουμε ότι η βασική ιδέα είναι να κατασκευάσουμε λύσεις μέσω της προσεγγιστικής ακολουθίας $x_m \in x_0 + \mathcal{K}_m$ επιλέγοντας το υπόλοιπο $r_m \perp \mathcal{L}_m$.

Έχοντας μια βάση V_m για τον $\mathcal{K}_m$ προτείνουμε $x_m = x_0 + V_m y$, με $y \in \mathbb{R}^m$.

Η επιλογή του $y \in \mathbb{R}^m$ γίνεται έτσι ώστε $r_m = b - Ax_m \in \mathcal{L}_m^\perp$.

GMRES

Στην μέθοδο αυτή $\mathcal{K}_m = \mathcal{K}^m(r_0, Ar_0, \dots, A^{m-1}r_0)$

Αν V_m ο πίνακας απο τα διανύσματα βάσης για τον $\mathcal{K}_m$ που παράγει η μέθοδος του Arnoldi στο m -βήμα επιλέγουμε

$$x_m = x_0 + V_m y \quad y \in \mathbb{R}^m$$

Το x_m θα πρέπει να είναι τέτοιο ώστε να επιλύει το πρόβλημα ελαχιστοποίησης

$$\min \|r_m\| = \min \|b - A(x_0 + V_m y)\| = \min \|r_0 - AV_m y\|.$$

Το πρώτο διάνυσμα του Arnoldi είναι το $v_1 = \frac{r_0}{\|r_0\|}$ οπότε αν $\beta = \|r_0\|$ έχουμε $r_0 = \beta v_1$.

Το πρόβλημα ελαχιστοποίησης γίνεται

$$\min \|r_m\| = \min \|\beta v_1 - AV_m y\| = \min \|\beta v_1 - V_{m+1} \bar{H}_m y\|,$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα της βάσης Arnoldi σύμφωνα με την οποία

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

Όμως

$$v_1 = V_{m+1}[1, 0, \dots, 0]^T = V_{m+1}e_1$$

οπότε το πρόβλημα ελαχιστοποίησης γράφεται

$$\min \|r_m\| = \min \|V_{m+1}(\beta e_1 - \bar{H}_m y)\| = \min \|\beta e_1 - \bar{H}_m y\|$$

όπου στο τελευταίο χρησιμοποιήσαμε την ορθοκανονικότητα των στηλών του V_{m+1} .

Η λύση του τελευταίου προβλήματος είναι η y_m τέτοια ώστε

$$\bar{H}_m y_m = \beta e_1$$

Δεδομένου ότι ο πίνακας $\bar{H}_m$ είναι πίνακας Hessenberg (ειδικής μορφής) η τελευταία εξίσωση είναι διαχειρίσιμη και μπορεί να γίνει με την διάσπαση QR .

Καταλήγουμε λοιπόν στην επαναληπτική εξίσωση

$$\begin{aligned} x_m &= x_0 + V_m y_m \\ \bar{H}_m y_m &= \beta e_1, \quad \beta = \|r_0\|, \end{aligned}$$

με $\bar{H}_m$, V_m τα αποτελέσματα από την μέθοδο Arnoldi

CG (Conjugate gradient)

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να λύσουμε το σύστημα $Ax = b$ για $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ συμμετρικό και θετικά ορισμένο.

Επιλέγουμε $x_m \in x_0 + \mathcal{K}_m$ με $\mathcal{K}_m = \mathcal{K}^m(r_0, A) = \text{span}(r_0, Ar_0, \dots, A^{m-1}r_0)$ μαζί με την συνθήκη ορθογωνιότητας $r_m = b - Ax_m \perp \mathcal{K}_m$.

Λόγω της συμμετρίας του πίνακα A , η μέθοδος του Arnoldi απλοποιείται στην μέθοδο του Lanczos και ο πίνακας H_m γίνεται τριδιαγώνιος

Η μεθοδος CG μπορεί να συνοψιστεί στη εξής επαναληπτική μέθοδο (όπου έχουμε συμπεριλάβει και 2 έξτρα βοηθητικές μεταβλητές p_m, z_m)

$$x_{m+1} = x_m + a_m p_m,$$

$$z_{m+1} = z_m - a_m A p_m$$

$$p_{m+1} = z_{m+1} + \beta_m p_m,$$

$$a_m = \frac{z_m^T z_m}{p_m^T A p_m}, \quad \beta_m = \frac{z_{m+1}^T z_{m+1}}{z_m^T z_m},$$

$$p_0 = y_0.$$

Παρατηρούμε ότι με αυτή την επιλογή για τα a_m, β_m ισχύει

$$z_{m+1}^T z_m = 0, \quad p_{m+1}^T A p_m = 0,$$

$$\text{ισοδ. } z_{m+1} \perp z_m \text{ και } p_{m+1} \perp A p_m.$$

MINRES

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να λύσουμε την $Ax = b$, με $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ συμμετρικό αλλά ούτε θετικά ούτε αρνητικά ορισμένο.

Για την μέθοδο αυτή πρέπει να χρησιμοποιήσουμε αντί της μεθόδου του Arnoldi την μέθοδο του Lanczos για την κατασκευή της βάσης του χώρου προβολής $\mathcal{K}_m = \mathcal{K}^m(r_0, A)$.

Η ελαχιστοποίηση του υπολοίπου $\|b - Ax_m\|$ γίνεται με παρόμοιο τρόπο όπως και πριν.