

**Krylov Subspace Methods in Finite Precision:
A Unified Approach**

Krylov-Unterraum-Verfahren in endlicher Genauigkeit:
Ein vereinheitlichender Ansatz

Jens-Peter M. Zemke

Dissertationsvortrag

14. Mai 2003

Übersicht

Motivation	2
Eine vereinheitlichte Matrix-Beschreibung	4
Auswirkungen endlicher Genauigkeit	7
Ein vereinheitlichender Ansatz	9
Ein kleiner Exkurs in Matrizen­theorie	10
„Rundreisen“	18
Konklusion & Ausblick	24
Ein Bild	25

Motivation. Warum sind Krylov-Räume interessant?

a) Benötigt wird nur Operation Matrix \times Vektor (“matrix-free”):

$$\mathcal{K}_k \equiv \text{span} \{q, Aq, \dots, A^{k-1}q\}.$$

b) Hauptprobleme der Linearen Algebra lassen sich als Approximationsaufgaben schreiben:

$$\left. \begin{array}{l} Av = v\lambda \\ Ax = b \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \chi(A) = 0 \\ x - A^{-1}b = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \chi(A)q = 0 \\ x - \rho(A)q = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} p(A)q \approx 0 \\ x - p(A)q \approx 0. \end{array} \right.$$

c) Solange $k \ll n$: **Operationsaufwand $\mathcal{O}(n)$** , i.e., kleiner als bei (anderen) direkten Methoden.

Dabei:

$$\chi(\lambda) \equiv \det(\lambda I - A), \quad \rho(\lambda) \equiv \frac{\chi(\lambda) - \det(-A)}{-\det(-A)\lambda}, \quad q = b/\|b\|.$$

Die Menagerie der Krylov-Raum Methoden.

- o Lanczos basierte Methoden (short-term methods)
- o Arnoldi basierte Methoden (long-term methods)

- o Eigenproblem-Löser: $Av = v\lambda$
- o Gleichungssystem-Löser: $Ax = b$
 - o (quasi-) orthogonal residual Ansätze: (Q)OR
 - o (quasi-) minimal residual Ansätze: (Q)MR

Erweiterungen:

- o Lanczos basierte Methoden:
 - o look-ahead
 - o product-type (LTPMs)
 - o angewandt auf die Normalgleichungen (CGN)
- o Arnoldi basierte Methoden:
 - o restart (thin/thick, explicit/implicit)
 - o truncation (standard/optimal)
 - o gemischte Ansätze

Eine vereinheitlichte Matrix-Beschreibung.

Ein Krylov-Raum wird aufgespannt von (den Spalten) einer Krylov-Matrix:

$$\mathcal{K}_k = \text{span}(K_k), \quad K_k = [q, Aq, \dots, A^{k-1}q].$$

Trivialerweise gilt

$$[q, AK_k] = K_{k+1}.$$

Die natürliche Basis K_k ist numerisch schlecht geeignet. Deshalb Wahl allgemeinerer Basen:

$$K_k = Q_k R_k, \quad R_k \text{ reguläre obere Dreiecksmatrix.}$$

Offensichtlich gilt auch

$K_{k+1} = Q_{k+1} R_{k+1}$, R_{k+1} reguläre obere Dreiecksmatrix,
wobei insbesondere alte Matrizen in neuen Matrizen enthalten sind:

$$Q_{k+1} = [Q_k, q_{k+1}], \quad R_{k+1} = \begin{pmatrix} R_k & r_{k+1} \\ 0 & r_{k+1,k+1} \end{pmatrix}.$$

Satz: Alle Verfahren lassen sich in der Form

$$AQ_k = Q_{k+1}\underline{C}_k = Q_k C_k + q_{k+1}c_{k+1,k}e_k^T$$

schreiben, wobei C_k eine *unreduzierte Hessenberg-Matrix* ist.

Beweis: Es gilt

$$\begin{aligned} [q, AK_k] &= [q, AQ_k R_k] = Q_{k+1} R_{k+1} = K_{k+1} \\ \Rightarrow [q, AQ_k] &= Q_{k+1} R_{k+1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R_k^{-1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Dieses ist eine *GR-Zerlegung* der erweiterten Matrix $[q, AQ_k]$.

(Das Verfahren von *Arnoldi* basiert auf der *QR-Zerlegung* von $[q, AQ_k]$.)

Weglassen der ersten Spalte liefert die zu beweisende Gleichung,

$$\begin{pmatrix} 1 & \\ 0 & \underline{C}_k \end{pmatrix} \equiv R_{k+1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R_k^{-1} \end{pmatrix}.$$

Aus *Dreieck*-Gestalt folgt *Hessenberg*-Gestalt.

Grundlegende Definitionen. (Auf einen Blick.)

o Krylov-Raum, Krylov-Basis

Natürliche Basis durch Spalten der Krylov-Matrix K_m , andere Basen:

$$K_k = Q_k R_k, \quad R_k \text{ reguläre obere Dreiecksmatrix.}$$

o Krylov-Zerlegung (C_k unreduziert Hessenberg)

$$A Q_k = Q_{k+1} \underline{C}_k = Q_k C_k + q_{k+1} c_{k+1,k} e_k^T.$$

o Krylov-Raum-Verfahren: Berechne Approximationen der Gestalt

$$x_k = Q_k z_k.$$

Verwende dazu nur Information aus

- o erster Basis Q_k (Q_{k+1}),
- o zweiter Basis \hat{Q}_k (\hat{Q}_{k+1}) und aus
- o Darstellung \underline{C}_k (C_k) von A .

Arnoldi:

$$Q_k^H Q_k = I_k, \quad H_k = Q_k^H A Q_k.$$

Lanczos:

$$\hat{Q}_k^H Q_k = I_k, \quad T_k = \hat{Q}_k^H A Q_k.$$

Auswirkungen endlicher Genauigkeit. (Sehr kurz.)

Aus Krylov-Zerlegung wird **perturbierte** Krylov-Zerlegung:

$$AQ_k + F_k = Q_{k+1}C_k.$$

Dabei Fehler bestimmt durch:

Verfahren
+ **Implementation**

⇒ Schranke

Ein Beispiel: **Lanczos**-Verfahren für symmetrische Matrizen.

Implementation: „beste“ Implementation nach C.C. Paige (**MGS**).

$$\Rightarrow \|f_j\| \leq (7\|A\| + m\|A\|)\epsilon \approx O(\|A\|\epsilon) \quad (\text{Paige } 197\{1|2|6\})$$

Anmerkung. Für einige Algorithmen Schranke nicht *a priori* festlegbar.

Eine perturbierte Krylov-Zerlegung läßt sich folgendermaßen **verbildlichen**:

$$\begin{array}{c} \boxed{A} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{Q_k} \end{array} - \begin{array}{c} \boxed{Q_k} \end{array} \begin{array}{c} \boxed{C_k} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{0} \end{array} - \begin{array}{c} \boxed{F_k} \end{array} .$$

Diese Darstellung wurde gewählt, um die perturbierte Krylov-Zerlegung aus der Sichtweise eines **approximativen Unterraumes** zu zeigen.

Das **Residuum** ist gegeben durch die Summe einer

- o sich **ändernden** Rang-Eins Matrix ($M_k \equiv q_{k+1} c_{k+1,k} e_k^T$)
- und einer
- o sich **nicht ändernden** (kleinen) Störungsmatrix ($-F_k$).

Ein vereinheitlichender Ansatz. Was bleibt . . .

Konzentration auf **Invarianten**:

Lokal erhalten: Eigenschaften von Q_k (e.g. Orthogonalität).

Invariant: Struktur von C_k , \underline{C}_k (i.e. Hessenberg-Gestalt).

Lokale **Orthogonalität**: Ansätze von

- o Paige (Lanczos symmetrisch),
- o Cullum & Willoughby (CG & Lanczos),
- o Simon (Lanczos symmetrisch),
- o Day (Lanczos), Bai (Lanczos),
- o Tong & Ye (BiCG),
- o Rozložník (GMRES).

Eigenschaften von **Hessenberg-Matrizen**?

⇒ Herleitung von Hessenberg-Eigenwert-Eigenvektor-Relationen.

⇒ Herleitung von Rückwärtsfehlern für prolongierte Eigenvektoren.

Ein kleiner Exkurs in Matrizen­theorie.

Eigenzerlegung (Jordan-Normal-Form) von A gegeben als

$$AV = VJ.$$

⇒ Eigenzerlegung der **Matrix-Familie** $zA \equiv zI - A$ gegeben durch (rechte) Eigenmatrix V und Matrix-Familie $zJ \equiv zI - J$:

$$zAV = VzJ.$$

Linke Eigenmatrizen:

$$\begin{aligned} \hat{V} &\equiv V^{-H} &\Rightarrow &\hat{V}^H zA = zJ \hat{V}^H, \\ \check{V} &\equiv V^{-T} &\Rightarrow &\check{V}^T zA = zJ \check{V}^T. \end{aligned}$$

Definition (Minoren von zA): Der Ausdruck zA_{ji} bezeichnet die Determinante von zA ohne Spalte i und Zeile j . Diese Zahlen werden als die **Minoren** von zA bezeichnet.

Definition (Cofaktoren von zA): Die mit dem Vorzeichen $(-1)^{i+j}$ versehenen Minoren zA_{ji} bezeichnet man als **Cofaktoren**.

Definition (Adjunkte von zA): Die **Adjunkte** wird klassisch als transponierte Matrix der Cofaktoren definiert:

$$P(z) \equiv \text{adj}(zA), \quad p_{ij}(z) \equiv (-1)^{i+j} \cdot zA_{ji}.$$

Die **Adjunkte** von zA erfüllt (Laplace-Entwicklung):

$$\text{adj}(zA)(zA) = \det(zA)I \equiv \chi(z)I.$$

Sei z nicht im Spektrum von A enthalten. Wir bilden die **Resolvente** $R(z) \equiv (zA)^{-1}$ von z und erhalten

$$P(z) \equiv \text{adj}(zA) = \chi(z)R(z) = \chi(z) V(zJ)^{-1} \hat{V}^H.$$

Mitte der rechten Seite der (leicht umgeformten) letzten Gleichung:

$$P(z) = V \chi(z) (zJ)^{-1} \hat{V}^H.$$

Gestalt von $G(z) \equiv \chi(z) (zJ)^{-1}$:

$$\begin{aligned} \chi(z) (zJ)^{-1} &= \bigoplus_{\lambda} \chi(z) (zJ_{\lambda})^{-1} \\ &= \bigoplus_{\lambda} \chi(z) \begin{pmatrix} (z - \lambda)^{-1} & \dots & (z - \lambda)^{-\ell} \\ & \ddots & \vdots \\ & & (z - \lambda)^{-1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Beobachtung: Terme mit **negativem** Exponenten kürzen sich mit entsprechenden Faktoren im charakteristischen Polynom $\chi(z)$.

Verfeinerung: Wir **teilen** durch den maximalen Faktor $(z - \lambda)^k$ und berechnen den **Limes** $z \rightarrow \lambda$ für ein λ .

Dazu: Interpretation der linken Seite der Gleichung

$$\lim P(z) = V \lim G(z) \hat{V}^H$$

mittels anderer (klassischer) Sichtweise der Adjunkte.

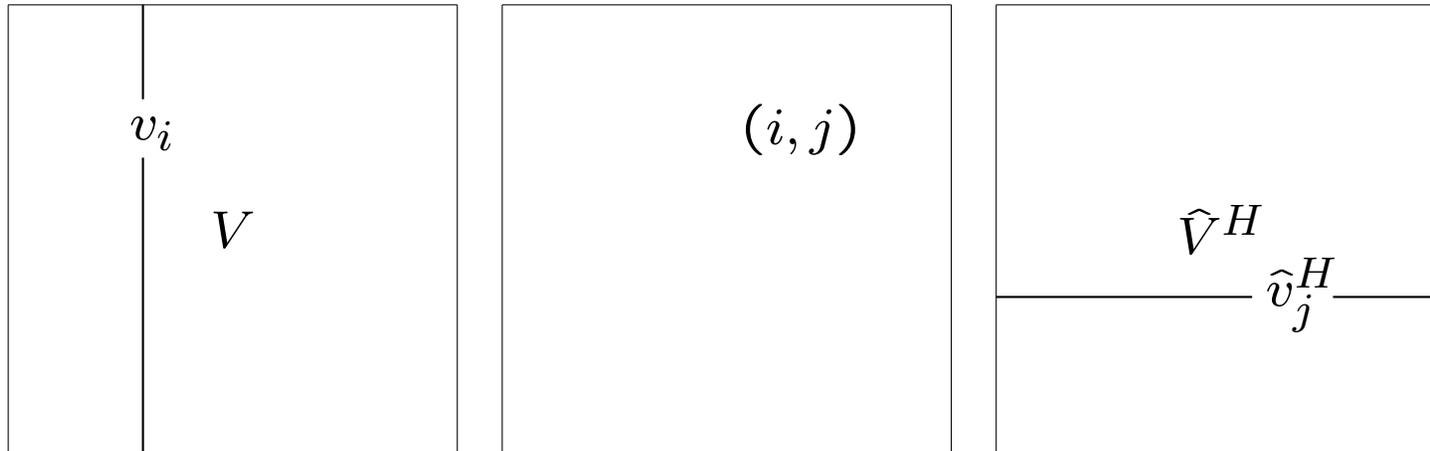
Anmerkung: Wenn auf der rechten Seite der Limes existiert, dann auch auf der linken Seite. Die Gleichheit bleibt erhalten.

Anmerkung': Diese (offensichtliche) letzte Anmerkung zeigt klar, daß einige der Polynome $p_{ij}(z)$ eine (mehrfache) Nullstelle λ haben.

Die resultierende **polynomiale** Gleichung $\lim P(z) = V \lim G(z) \hat{V}^H$ ist eine

Quelle von Eigenwert–Eigenvektor–Relationen.

Beobachtung: Nur wenige Elemente von $\lim G$ sind **nicht-Null**. Die „ausgewählten“ **Eigenvektoren** basieren auf den nicht-Null Positionen i, j :



Wir betrachten im Weiteren nur noch den speziellen Fall von **nicht-derogativen** Eigenwerten (geometrische Vielfachheit gleich Eins).

Wir erhalten Gleichungen, die (einige der) Elemente von **$\lim P$** , **$\lim G$** und **Produkte von linken und rechten Eigenvektorkomponenten** involvieren.

Satz: Sei $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Sei $\lambda_l = \lambda_{l+1} = \dots = \lambda_{l+k}$ ein geometrisch einfacher Eigenwert von A . Sei $k+1$ die algebraische Multiplizität von λ . Seien \hat{v}_{l+k}^H und v_l die zugehörigen linken und rechten Eigenvektoren mit entsprechender Normalisierung.

Dann gilt

$$v_{jl} \tilde{v}_{i,l+k} = \frac{p_{ji}(\lambda_l)}{\prod_{\lambda_s \neq \lambda_l} (\lambda_l - \lambda_s)}.$$

($\lim P$ ergibt den Zähler, $\lim G$ ergibt den Nenner.)

Dieser Satz ist auf *alle* Eigenwerte einer nicht-derogativen Matrix A anwendbar.

Krylov-Verfahren basieren auf unreduzierten Hessenberg-Matrizen. Sei jetzt $H \equiv A$ unreduziert Hessenberg.

Es bezeichne $\mathcal{H}(m)$ die Menge der unreduzierten Hessenberg-Matrizen der Dimension $m \times m$. Das allgemeine(re) Eigenwert–Eigenvektor–Resultat vereinfacht sich zu:

Satz: Sei $H \in \mathcal{H}(m)$. Sei $i \leq j$. Sei θ ein Eigenwert von H der Multiplizität $k + 1$. Sei s der eindeutige linke Eigenvektor und \hat{s}^H der eindeutige rechte Eigenvektor zum Eigenwert θ .

Dann gilt

$$\check{s}(i)s(j) = \left[\frac{\chi_{H_{1:i-1}} \chi_{H_{j+1:m}}}{\chi_{H_{1:m}}^{(k+1)}}(\theta) \right] \prod_{l=i}^{j-1} h_{l+1,l}. \quad (1)$$

Bemerkung: Wir haben die implizite **Skalierung** der Eigenvektoren (erzwungen durch die Wahl der Eigenmatrizen) ignoriert, i.e., $\check{S}^T S = I$.

„Rundreisen“

Der Einfachheit halber sei die gegebene perturbierte Krylov-Zerlegung (**Matrix-Schreibweise**)

$$M_k = A Q_k - Q_k C_k + F_k$$

diagonalisierbar, i.e., A und C_k seien diagonalisierbar. Bezeichne $y_j \equiv Q_k s_j$ den j ten Ritz-Vektor. Die Einflüsse der Fehler lassen sich folgendermaßen mittels Eigenpaar und Ritz-Paar ausdrücken:

Satz: Die Rekursion der Basisvektoren q_k läßt sich wie folgt schreiben (**Eigenpaar – Ritz-Paar-Schreibweise**):

$$\hat{v}_i^H q_{k+1} = \frac{(\lambda_i - \theta_j) \hat{v}_i^H y_j + \hat{v}_i^H F_k s_j}{c_{k+1,k} s_{kj}} \quad \forall i, j(, k).$$

Diese *lokale Fehler-Verstärkungsformel* besteht aus vier Ingredienzien.

Diese Gleichung hängt vom (a priori unbekanntem) *Ritz-Paar* ab. Wenn wir die Eigenbasis verwenden,

$$I = SS^{-1} = S\check{S}^T \quad \Rightarrow \quad e_l = S\check{S}^T e_l \equiv \sum_{j=1}^k \check{s}_{lj} s_j,$$

erhalten wir eine Gleichung *ohne* den **Ritz Vektor**:

Satz: Die Rekursion der Basisvektoren zwischen q_l und q_{k+1} ist gegeben durch (**Eigenpaar – Eigenpaar-Schreibweise**):

$$\left[\sum_{j=1}^k \frac{c_{k+1,k} \check{s}_{lj} s_{kj}}{\lambda_i - \theta_j} \right] \hat{v}_i^H q_{k+1} = \hat{v}_i^H q_l + \hat{v}_i^H F_k \left[\sum_{j=1}^k \left(\frac{\check{s}_{lj}}{\lambda_i - \theta_j} \right) s_j \right].$$

Für $l = 1$ erhalten wir eine Gleichung, die die Einflüsse der Fehler ab dem Start verdeutlicht:

$$\left[\sum_{j=1}^k \frac{c_{k+1,k} \check{s}_{1j} s_{kj}}{\lambda_i - \theta_j} \right] \hat{v}_i^H q_{k+1} = \hat{v}_i^H q_1 + \hat{v}_i^H F_k \left[\sum_{j=1}^k \left(\frac{\check{s}_{1j}}{\lambda_i - \theta_j} \right) s_j \right].$$

Interpretation: Die Stärke der Abweichung hängt von der *Größe* der *ersten Komponente* des *linken* Eigenvektors \tilde{s}_j von C_k und der *Form und Größe* des *rechten* Eigenvektors s_j ab.

Anwendung der Eigenwert–Eigenvektor–Relation (1) entfernt die Abhängigkeit von den Eigenvektoren (setze $k = 0, i = 1, m = k, j = k$):

$$\tilde{s}(i)s(j) = \left[\frac{\chi_{C_{1:i-1}} \chi_{C_{j+1:m}}}{\chi_{C_{1:m}}^{(k+1)}}(\theta) \right] \prod_{l=i}^{j-1} c_{l+1,l}.$$

Satz: Die Rekursion zwischen den Basisvektoren q_1 und q_{k+1} läßt sich wie folgt schreiben (**Eigenpaar – Eigenwert-Schreibweise**):

$$\left[\sum_{j=1}^k \frac{\prod_{p=1}^k c_{p+1,p}}{\prod_{s \neq j} (\theta_s - \theta_j) (\lambda_i - \theta_j)} \right] \hat{v}_i^H q_{k+1} = \hat{v}_i^H q_1 + \hat{v}_i^H F_k \left[\sum_{j=1}^k \left(\frac{\tilde{s}_{1j}}{\lambda_i - \theta_j} \right) s_j \right]$$

Zeit für ein schönes Resultat aus der **Polynom-Interpolation** (Lagrange):

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^k \frac{1}{\prod_{l \neq j} (\theta_j - \theta_l) (\lambda_i - \theta_j)} &= \frac{1}{\chi_{C_k}(\lambda_i)} \sum_{j=1}^k \frac{\prod_{l \neq j} (\lambda_i - \theta_l)}{\prod_{l \neq j} (\theta_j - \theta_l)} \\ &= \frac{1}{\chi_{C_k}(\lambda_i)}. \end{aligned}$$

Damit können wir den letzten Satz schöner schreiben:

Satz: Die Rekursion zwischen den Basisvektoren q_1 und q_{k+1} kann wie folgt geschrieben werden (**Eigenpaar – Polynom-Schreibweise**):

$$\hat{v}_i^H q_{k+1} = \frac{\chi_{C_k}(\lambda_i)}{\prod_{p=1}^k c_{p+1,p}} \left(\hat{v}_i^H q_1 + \hat{v}_i^H F_k \left[\sum_{j=1}^k \left(\frac{\check{s}_{1j}}{\lambda_i - \theta_j} \right) s_j \right] \right).$$

Genauso können wir die **Eigenvektoren** s_j in dem bisher vernachlässigten Fehler-Term loswerden:

$$e_l^T \left[\sum_{j=1}^k \left(\frac{\tilde{s}_{1j}}{\lambda_i - \theta_j} \right) s_j \right] = \sum_{j=1}^k \left(\frac{\tilde{s}_{1j} s_{lj}}{\lambda_i - \theta_j} \right) = \frac{\prod_{p=1}^{l-1} c_{p+1,p} \chi_{C_{l+1:k}}(\lambda_i)}{\chi_{C_k}(\lambda_i)}$$

Dieses ergibt zusammen den folgenden

Satz: Die Rekursion zwischen den Basisvektoren q_1 und q_{k+1} kann wie folgt geschrieben werden (**Eigenpaar – Polynom-Schreibweise'**):

$$\begin{aligned} \hat{v}_i^H q_{k+1} &= \frac{\chi_{C_k}(\lambda_i)}{\prod_{p=1}^k c_{p+1,p}} \left(\hat{v}_i^H q_1 + \hat{v}_i^H \sum_{l=1}^k \frac{\prod_{p=1}^{l-1} c_{p+1,p} \chi_{C_{l+1:k}}(\lambda_i)}{\chi_{C_k}(\lambda_i)} f_l \right) \\ &= \frac{\chi_{C_k}(\lambda_i)}{\prod_{p=1}^k c_{p+1,p}} \cdot \hat{v}_i^H q_1 + \sum_{l=1}^k \left(\frac{\chi_{C_{l+1:k}}(\lambda_i)}{\prod_{p=l+1}^k c_{p+1,p}} \cdot \frac{\hat{v}_i^H f_l}{c_{l+1,l}} \right). \end{aligned}$$

Multiplikation mit den rechten Eigenvektoren v_i und Aufsummation ergibt das folgende finale Resultat unserer „Rundreise“:

Satz: Die Rekursion der Basisvektoren eines perturbierten Krylov-Raum-Verfahrens gehorchen folgender Regel (**Matrix – Polynom-Schreibweise**):

$$q_{k+1} = \frac{\chi_{C_k}(A)}{\prod_{p=1}^k c_{p+1,p}} \cdot q_1 + \sum_{l=1}^k \left(\frac{\chi_{C_{l+1:k}}(A)}{\prod_{p=l+1}^k c_{p+1,p}} \cdot \frac{f_l}{c_{l+1,l}} \right).$$

Anmerkung: Dieses Resultat gilt auch im Falle **nicht-diagonalisierbarer** Matrizen A, C_k .

Interpretation: Die perturbierten Verfahren lassen sich als *additive **Mixtur*** mehrerer Instanzen desselben Verfahrens mit verschiedenen Startvektoren interpretieren.

Eine Faustregel: Eine *starke **Abweichung*** tritt auf, wenn eines der Polynome $\chi_{C_{l+1:k}}(A)$ ‘groß’ verglichen mit $\chi_{C_k}(A)$ wird.

Konklusion & Ausblick

Konklusion:

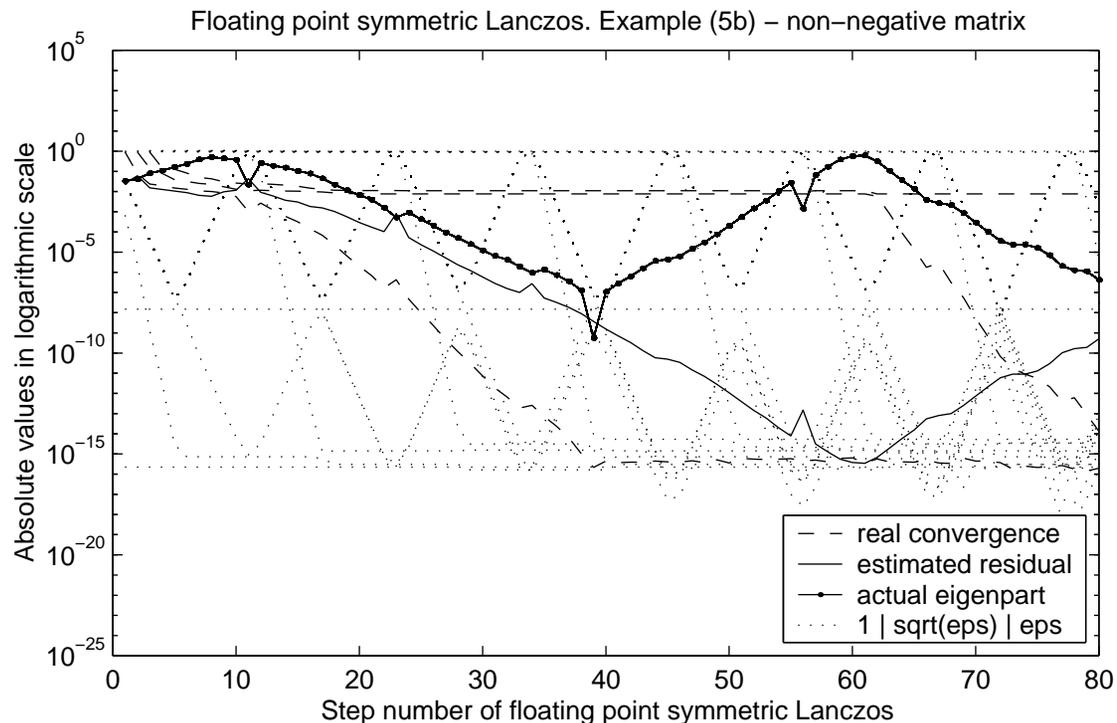
- o Krylov-Verfahren lassen sich (bis zu einem gewissen Grad) einheitlich behandeln.
- o Die beobachteten Charakteristika lassen sich schon aus dieser generellen Sichtweise erklären.
- o Die Vorgehensweise zur Fehleranalyse eines gegebenen Krylov-Raum-Verfahrens läßt sich stark schematisieren.

Ausblick:

- o Es fehlen (noch) angepaßte Termini zur Stabilitätsanalyse von Krylov-Raum-Verfahren.

Ein Bild. (Zum Abschluß.)

$A = A^T \in \mathbb{R}^{100 \times 100}$, Zufallseinträge in $[0, 1]$. Perron-Wurzel gut separiert.



Verhalten vom [symmetrischen Lanczos-Verfahren](#), Konvergenz gegen den Eigenwert mit größtem und zweitgrößtem Modulus.