Convergenza di un metodo numerico per il calcolo degli autovalori di matrici simmetriche DPSS

Dario Fasino

Dip.to Matematica e Informatica, Udine

Perugia, GALN 2009

Come calcoliamo autovalori?

1. Matrici generiche (tutti gli autovalori):
   Metodi basati su iterazione di sottospazi — fattorizzazioni "GR" (QR, LR, SR, HR).
   - Riduzione preliminare in forma strutturata.
2. Matrici grandi, sparse (solo pochi autovalori):
   Metodi di Krylov (Arnoldi, Lanczos)
   $\longrightarrow$ Riduzione-compressione in forma strutturata.

D. S. Watkins.
The Matrix Eigenvalue Problem. GR and Krylov Subspace Methods.
SIAM, 2007.

Sommario

1. Introduzione
   - Matrici DPSS simmetriche
   - Il metodo proposto
   - La trasformazione DPSS$\rightarrow$DPSS
2. Analisi di convergenza
   - Analisi perturbativa della riduzione in forma DPSS
   - Convergenza quadratica

Matrici DPSS simmetriche

- matrice simmetrica semiseparabile:

$$S = \begin{pmatrix} u_1 v_1 & u_2 v_1 & \cdots & u_n v_1 \\ u_2 v_1 & u_2 v_2 & \ddots & u_n v_2 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ u_n v_1 & u_n v_2 & \cdots & u_n v_n \end{pmatrix}$$

- matrice DPSS simmetrica:

$$M = D + S, \qquad D = \mathrm{Diag}(d_1, \ldots, d_n)$$

Il Libro

R. Vandebril, M. Van Barel, N. Mastronardi.
Matrix Computations and Semiseparable Matrices.
The Johns Hopkins University Press, 2008.

- Vol. I: Linear Systems
- Vol. II: Eigenvalue and Singular Value Methods

SSPack: `http://www.cs.kuleuven.be/~mase`

La forma DPSS è "solo" una struttura matriciale come tante altre?

Un algoritmo interessante

Data una matrice simmetrica A e una matrice diagonale D,
è possibile costruire una matrice ortogonale Q
e una matrice simmetrica semiseparabile S
tali che $Q^T A Q = D + S$.
Costo computazionale: $O(n^3)$ — come tridiagonalizzazione.

Osservazioni:

- Quando D approssima lo spettro di A, la norma di S è piccola.
- Se A è già DPSS, il costo computazionale diventa $O(n^2)$.

Notazione: $S = \mathcal{R}(A, D)$ (ovvero: $Q^T A Q = \mathcal{R}(A, D) + D$).

Il metodo proposto

Problema

Calcolare gli autovalori di $A = A^T = D + S$ (possibilmente, $\Lambda \approx D$).

Metodo proposto:

1. $A_0 = A$, $D_0 = D$
2. `for` $i = 1, 2, \ldots$
   1. Calcola (formule alternative):

$$A_i = \begin{cases} \mathcal{R}(A_0, D_{i-1}) + D_{i-1} & \text{oppure} \\ \mathcal{R}(A_{i-1}, D_{i-1}) + D_{i-1} & \end{cases}$$

   2. $D_i = \mathrm{Diag}(A_i)$.

Nota: tutte matrici simmetriche DPSS.

La trasformazione DPSS→DPSS

Trasformazione DPSS→DPSS con diagonale diversa

Esempio, $n = 5$

$$A = \begin{pmatrix} D & S & S & S & S \\ S & D & S & S & S \\ S & S & D & S & S \\ S & S & S & D & S \\ S & S & S & S & D \end{pmatrix}$$

La trasformazione DPSS→DPSS

Trasformazione DPSS→DPSS con diagonale diversa

Esempio, $n = 5$

$$A = \begin{pmatrix} D & S & S & S & S \\ S & D & S & S & S \\ S & S & D & S & S \\ S & S & S & D & S \\ S & S & S & S & D \end{pmatrix}$$

Prima fase; primo passo:

$$\begin{pmatrix} D & S & S & S & S \\ S & D & S & S & S \\ S & S & D & S & S \\ S & S & S & D & S \\ S & S & S & S & D \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} D & S & S & S & \\ S & D & S & S & \\ S & S & D & S & \\ S & S & S & D & T \\ & & & T & T \end{pmatrix}$$

La trasformazione DPSS→DPSS

Trasformazione DPSS→DPSS con diagonale diversa
Prima fase; passi successivi:

$$\begin{pmatrix} D & S & S & & \\ S & D & S & & \\ S & S & D & T & \\ & & T & T & T \\ & & & T & T \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} D & S & & & \\ S & D & T & B & \\ & T & T & T & \\ & B & T & T & T \\ & & & T & T \end{pmatrix}$$

$$\longrightarrow \begin{pmatrix} D & S & & & \\ S & D & T & & \\ & T & T & T & B \\ & & T & T & T \\ & & B & T & T \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} D & S & & & \\ S & D & T & & \\ & T & T & T & \\ & & T & T & T \\ & & & T & T \end{pmatrix}$$

La trasformazione DPSS→DPSS

Trasformazione DPSS→DPSS con diagonale diversa
Seconda fase; primo passo:

$$\begin{pmatrix} T & T & & & & \\ T & T & T & & & \\ & T & T & T & 0 & \\ & & T & T & T & \\ & & 0 & T & T & \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} T & T & & & \\ T & T & T & & \\ & T & T & S & S \\ & & S & D & S \\ & & S & S & D \end{pmatrix}$$

La trasformazione DPSS→DPSS

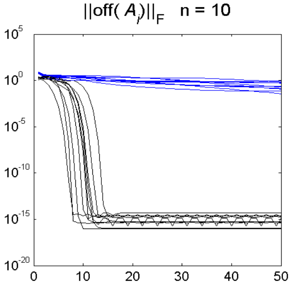
Trasformazione DPSS→DPSS con diagonale diversa
Seconda fase; passi successivi:

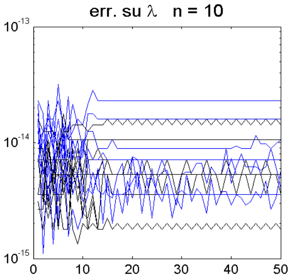
$$
\begin{pmatrix}
T & T & 0 & & \\
T & D & S & S & S \\
0 & S & D & S & S \\
 & S & S & D & S \\
 & S & S & S & D
\end{pmatrix}
\longrightarrow
\begin{pmatrix}
D & S & S & 0 & \\
S & D & S & 0 & \\
S & S & D & S & S \\
 & 0 & S & D & S \\
 & 0 & S & S & D
\end{pmatrix}
$$

$$
\longrightarrow
\begin{pmatrix}
D & S & S & S & 0 \\
S & D & S & S & 0 \\
S & S & D & S & S \\
S & S & S & D & S \\
0 & 0 & 0 & S & D
\end{pmatrix}
\longrightarrow
\begin{pmatrix}
D & S & S & S & S \\
S & D & S & S & S \\
S & S & D & S & S \\
S & S & S & D & S \\
S & S & S & S & D
\end{pmatrix}
$$

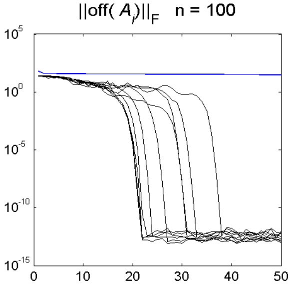
Esperimenti numerici

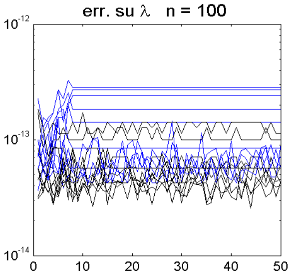
```
for i = 1:nit
    [G,d] = CSSD(A0,D);
    A = BSSD(G,d,D);
    D = diag(A);
    err(i) = norm(A-diag(D),'fro');
end
```





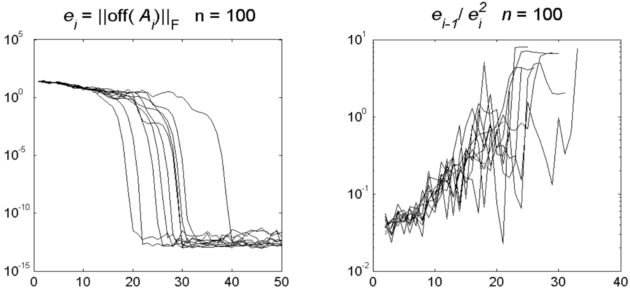
```
for i = 1:nit
    [G,d] = CSSD(A0,D);
    A = BSSD(G,d,D);
    D = diag(A);
    err(i) = norm(A-diag(D),'fro');
end
```





Esperimenti numerici

```
for i = 1:nit
    [G,d] = CSSD(A0,D);
    A = BSSD(G,d,D);
    D = diag(A);
    err(i) = norm(A-diag(D),'fro');
end
```



Notazioni e fatti salienti

Sia $A = A^T$. Supponiamo ben definiti

1. $\mathcal{K}(A, v, D) = [\,(d_1 I - A)^{-1} v, \ldots, (d_n I - A)^{-1} v\,]$
2. $\mathcal{Q}(A, v, D) =$ fattore ortogonale di $\mathcal{K}(A, v, D)$
3. $\mathcal{S}(A, v, D) = Q^T A Q - D$,
   la parte semiseparabile di $M = D + S = Q^T A Q$,
   con $Q = \mathcal{Q}(A, v, D)$.

Fatto importante

$\mathcal{R}(A, D) = \mathcal{S}(A, v(A, D), D)$, con $v = v(A, D)$ funzione *smooth*.

Notazioni e fatti salienti

Sia $A = A^T$. Supponiamo ben definiti

1. $\mathcal{K}(A, v, D) = [\,(d_1 I - A)^{-1} v, \ldots, (d_n I - A)^{-1} v\,]$
2. $\mathcal{Q}(A, v, D) =$ fattore ortogonale di $\mathcal{K}(A, v, D)$
3. $\mathcal{S}(A, v, D) = Q^T A Q - D$,
   la parte semiseparabile di $M = D + S = Q^T A Q$,
   con $Q = \mathcal{Q}(A, v, D)$.

Proprietà di invarianza: $v \to \alpha v$; inoltre, se U è ortogonale,

1. $\mathcal{K}(UAU^T, Uv, D) = U\mathcal{K}(A, v, D)$
2. $\mathcal{Q}(UAU^T, Uv, D) = U\mathcal{Q}(A, v, D)$
3. $\mathcal{S}(UAU^T, Uv, D) = \mathcal{S}(A, v, D)$.

Per una analisi perturbativa, possiamo supporre che $A = \Lambda$ sia diagonale.

Analisi perturbativa

Sia $\Delta = \mathrm{Diag}(\delta)$ fissata, $\delta_i \neq 0$. Consideriamo

- $K_\varepsilon = \mathcal{K}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$
- $Q_\varepsilon = \mathcal{Q}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$
- $S_\varepsilon = \mathcal{S}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$

e i loro limiti per $\varepsilon \to 0$.

$$
\begin{aligned}
K_\varepsilon &= [w_i/(\lambda_i + \varepsilon\delta_i - \lambda_j)] \\
&= \left[I + \varepsilon \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & & \frac{w_i}{w_j}\frac{\delta_j}{\lambda_i - \lambda_j} \\ & \ddots & \\ \frac{w_i}{w_j}\frac{\delta_j}{\lambda_i - \lambda_j} & & 0 \end{pmatrix}}_{E} + O(\varepsilon^2) \right] \begin{pmatrix} \frac{w_1}{\varepsilon\delta_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{w_n}{\varepsilon\delta_n} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow Q_\varepsilon$ è il fattore ortogonale della matrice in $[\cdots]$.

Analisi perturbativa

Sia $\Delta = \mathrm{Diag}(\delta)$ fissata, $\delta_i \neq 0$. Consideriamo

- $K_\varepsilon = \mathcal{K}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$
- $Q_\varepsilon = \mathcal{Q}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$
- $S_\varepsilon = \mathcal{S}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$

e i loro limiti per $\varepsilon \to 0$.

Teorema

$$E \equiv (e_{ij}), \;\; e_{ij} = \begin{cases} \frac{w_i}{w_j} \frac{\delta_j}{\lambda_i - \lambda_j} & i \neq j \\ 0 & i = j \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad \|Q_\varepsilon - I\|_F \lesssim \sqrt{2}|\varepsilon|\|E\|_F.$$

In particolare, $\|Q_\varepsilon - I\|_F = O(\|\varepsilon\Delta\|)$, e $\lim_{\varepsilon \to 0} Q_\varepsilon = I$.

Analisi perturbativa

Sia $\Delta = \mathrm{Diag}(\delta)$ fissata, $\delta_i \neq 0$. Consideriamo

- $K_\varepsilon = \mathcal{K}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$
- $Q_\varepsilon = \mathcal{Q}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$
- $S_\varepsilon = \mathcal{S}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$

e i loro limiti per $\varepsilon \to 0$.

Se $\varepsilon \to 0$, da $Q_\varepsilon \to I$ troviamo anche $S_\varepsilon \to O$:

$$S_\varepsilon = Q_\varepsilon^T \Lambda Q_\varepsilon - (\Lambda + \varepsilon\Delta) \to O.$$

Più precisamente:

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} S_\varepsilon = \widehat{S}, \qquad \mathrm{Diag}(\widehat{S}) = -\Delta,$$

indipendentemente da w.

Analisi perturbativa

Sia $\Delta = \mathrm{Diag}(\delta)$ fissata, $\delta_i \neq 0$. Consideriamo

- $K_\varepsilon = \mathcal{K}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$
- $Q_\varepsilon = \mathcal{Q}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$
- $S_\varepsilon = \mathcal{S}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)$

e i loro limiti per $\varepsilon \to 0$.

Teorema

$$\mathrm{Diag}\left[\mathcal{S}(\Lambda, w, \Lambda + \varepsilon\Delta)\right] = -\varepsilon\Delta + o(\varepsilon).$$

A meno di termini $O(\varepsilon^2)$,

$$\begin{aligned}
e_i^T S_\varepsilon e_i &= e_i^T \left(Q_\varepsilon^T \Lambda Q_\varepsilon - (\Lambda + \varepsilon\Delta) \right) e_i \\
&= e_i^T (I - \varepsilon X) \Lambda (I + \varepsilon X) e_i - (\lambda_i + \varepsilon\delta_i) \\
&= e_i^T \Lambda e_i + \varepsilon e_i^T (\Lambda X - X\Lambda) e_i - (\lambda_i + \varepsilon\delta_i) \\
&= -\varepsilon\delta_i .
\end{aligned}$$

Ulteriori dettagli

Q_ε è caratterizzata dalla sua prima colonna
(teorema del Q-implicito per matrici DPSS),

$$Q_\varepsilon e_1 \propto K_\varepsilon e_1 \propto \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} 0 \\ \\ \frac{w_i}{w_1} \frac{\delta_1}{\lambda_i - \lambda_1} \\ \\ \end{pmatrix}.$$

Inoltre,

$$\begin{aligned} \hat{S} e_1 &= \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} \left[Q_\varepsilon^T \Lambda Q_\varepsilon - (\Lambda + \varepsilon \Delta) \right] e_1 \\ &= (\Lambda - \lambda_1 I) X e_1 - \delta e_1 \\ &= - \left(\delta_1, \delta_1 \frac{w_2}{w_1}, \ldots, \delta_1 \frac{w_n}{w_1} \right)^T = - \frac{\delta_1}{w_1} w. \end{aligned}$$

Convergenza quadratica

Possiamo riformulare il metodo

$$A_i = \mathcal{R}(A_0, D_{i-1}) + D_{i-1}, \qquad D_i = \mathrm{Diag}(A_i),$$

come iterazione di punto fisso: $D_i = \Phi(D_{i-1})$.

Sia $\Phi : \mathrm{Diag} \mapsto \mathrm{Diag}$ l'operatore definito come

$$\Phi(D) = \mathrm{Diag}(\mathcal{R}(A, D)) + D.$$

Nota: $A = U \Lambda U^T \iff \Phi(\Lambda) = \Lambda$.

Convergenza quadratica

Possiamo riformulare il metodo

$$A_i = \mathcal{R}(A_0, D_{i-1}) + D_{i-1}, \qquad D_i = \mathrm{Diag}(A_i),$$

come iterazione di punto fisso: $D_i = \Phi(D_{i-1})$.

$$\begin{aligned}
\Phi'(\Lambda)\Delta &= \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{\varepsilon}\Big(\Phi(\Lambda+\varepsilon\Delta) - \Phi(\Lambda)\Big) \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{\varepsilon}\Big(\mathrm{Diag}(\mathcal{R}(A,\Lambda+\varepsilon\Delta)) - \mathrm{Diag}(\mathcal{R}(A,\Lambda)) + \varepsilon\Delta\Big) \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{1}{\varepsilon}\Big(-\varepsilon\Delta + \varepsilon\Delta + O(\varepsilon^2)\Big) = O.
\end{aligned}$$

Convergenza quadratica

Possiamo riformulare il metodo

$$A_i = \mathcal{R}(A_0, D_{i-1}) + D_{i-1}, \qquad D_i = \mathrm{Diag}(A_i),$$

come iterazione di punto fisso: $D_i = \Phi(D_{i-1})$.

$$\|D_i - \Lambda\| = \|\Phi(D_{i-1}) - \Phi(\Lambda)\| \leq C\|D_{i-1} - \Lambda\|^2 + o(\|D_{i-1} - \Lambda\|^2).$$

Teorema

Per $\varepsilon > 0$ abbastanza piccolo,

$$\|D_{i-1} - \Lambda\| \leq \varepsilon \quad \Longrightarrow \quad \|D_i - \Lambda\| \leq C\varepsilon^2.$$

Conclusioni

Un metodo per il calcolo simultaneo degli autovalori di matrici simmetriche DPSS

Il termine diagonale viene usato come un insieme di n shift simultanei

Non è riconducibile ad un metodo GR o iterazione di sottospazi (infatti gli autovalori non risultano ordinati)

Costo $O(n^2)$ per passo, numero di passi cresce lentamente con n.

Possibile sviluppo: Calcolo autovalori generalizzati per *pencils* tridiagonali.