

Il metodo Jacobi-Davidson

Un metodo iterativo per il calcolo degli autovalori

Francesca Rizzo

10 giugno 2023

Outline

1 Metodi per il calcolo degli autovalori

- Quoziente di Rayleigh-Ritz
- Il metodo di Davidson
- I metodi di Jacobi

2 Il nuovo metodo Jacobi-Davidson

- Presentazione del metodo
- L'algoritmo
- Risoluzione dell'equazione di Jacobi-Davidson

3 Convergenza

Quozienti di Rayleigh

Definizione

Sia A una matrice reale simmetrica di taglia n : la funzione

$$\rho : \mathbb{R}^n \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R} \text{ t.c. } \rho(x) = \frac{x^t A x}{x^t x}$$

è detta quoziente di Rayleigh

I punti stazionari del quoziente di Rayleigh sono gli autovettori, e quindi, se ordiniamo gli autovalori in modo che $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ vale che:

$$\max_{x \neq 0} \rho(x) = \lambda_1 \text{ e } \min_{x \neq 0} \rho(x) = \lambda_n$$

Courant-Fisher

Teorema (Courant-Fisher)

Data A matrice simmetrica reale di taglia n con autovalori

$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$, vale

$$\min_{\substack{U \subset \mathbb{R}^n \\ \dim(U)=k}} \max_{x \in U} \frac{x^t A x}{x^t x} = \lambda_{n-k+1}, \quad \forall k = 1, \dots, n \quad (1)$$

$$\max_{\substack{U \subset \mathbb{R}^n \\ \dim(U)=k}} \min_{x \in U} \frac{x^t A x}{x^t x} = \lambda_k, \quad \forall k = 1, \dots, n \quad (2)$$

I valori di Ritz

Definizione (Valori di Ritz)

Data A matrice di taglia n e $\mathcal{K}$ sottospazio di $\mathbb{R}^n$, chiamiamo *valori di Ritz di A relativi al sottospazio $\mathcal{K}$* gli autovalori della matrice A proiettata su $\mathcal{K}$.

In particolare se $\{v_1, \dots, v_k\}$ è una base ortonormale di $\mathcal{K}$, detta $V = [v_1, \dots, v_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}$, i valori *valori di Ritz di A relativi al sottospazio $\mathcal{K}$* sono gli autovalori della matrice $B = V^*AV$

Quindi *valori di Ritz di A relativi al sottospazio $\mathcal{K}$* sono i punti critici di

$$\rho_B(x) = \frac{x^t B x}{x^t x} = \rho_B(x) = \frac{x^t V^t A V x}{x^t x}, \text{ al variare di } x \in \mathbb{R}^k, \text{ ovvero}$$

$$\rho_A(x) = \frac{y^t A y}{y^t y}, \text{ al variare di } y = Vx \in \mathcal{K}$$

I valori di Ritz

Definizione (Valori di Ritz)

Data A matrice di taglia n e $\mathcal{K}$ sottospazio di $\mathbb{R}^n$, chiamiamo *valori di Ritz di A relativi al sottospazio $\mathcal{K}$* gli autovalori della matrice A proiettata su $\mathcal{K}$.

In particolare se $\{v_1, \dots, v_k\}$ è una base ortonormale di $\mathcal{K}$, detta $V = [v_1, \dots, v_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}$, i valori *valori di Ritz di A relativi al sottospazio $\mathcal{K}$* sono gli autovalori della matrice $B = V^* A V$

Quindi *valori di Ritz di A relativi al sottospazio $\mathcal{K}$* sono i punti critici di

$$\rho_B(x) = \frac{x^t B x}{x^t x} = \rho_B(x) = \frac{x^t V^t A V x}{x^t x}, \text{ al variare di } x \in \mathbb{R}^k, \text{ ovvero}$$

$$\rho_A(x) = \frac{y^t A y}{y^t y}, \text{ al variare di } y = V x \in \mathcal{K}$$

Convergenza verso gli autovalori estremali

Consideriamo $\forall m$ $V_m = [v_1, \dots, v_m]$ con $\{v_1, \dots, v_m\}$ base ortonormale di $\mathcal{K}_m$.

Siano ora $(\theta_i^{(m)}, s_i^{(m)})$ le autocopie della matrice $B_m = V_m^* A V_m$ (in questo caso $u_i^{(m)} = V_m s_i^{(m)}$ si dicono *vettori di Ritz di A su K*), ordinati in modo che

$$\theta_1^{(m)} = \rho_A(u_1^{(m)}) \geq \dots \geq \theta_m^{(m)} = \rho_A(u_m^{(m)}), \text{ vale:}$$

$$\lambda_1 \geq \theta_1^{(m)} = \max_{y \in \mathcal{K}_m} \frac{y^t A y}{y^t y} \geq \lambda_{n+1-m} \quad \text{e} \quad \lambda_n \leq \theta_m^{(m)} = \min_{y \in \mathcal{K}_m} \frac{y^t A y}{y^t y} \leq \lambda_m$$

e $\theta_1^{(m)}$ sono una successione crescente, $\theta_m^{(m)}$ sono una decrescente.

Il metodo di Davidson

Il metodo di Davidson è un metodo iterativo per il calcolo di alcuni autovalori estremali di una matrice simmetrica che sfrutta i risultati citati sui valori di Ritz.

Supponiamo di voler cercare gli autovalori di una matrice A e di conoscere (θ, u) coppia di Ritz (approssimazione dell'autocoppia (λ, v) , con λ autovalore di modulo massimo) di A relativa ad sottospazio $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^n$.

Vogliamo cercare t tale che

$$A(u + t) = \lambda(u + t) \Rightarrow (A - \lambda I)t = -(A - \lambda I)u$$

Davidson propone di risolvere: $(D_A - \theta I)t = -r$ con $r = (A - \theta I)u$.

Il metodo di Davidson

Il metodo di Davidson è un metodo iterativo per il calcolo di alcuni autovalori estremali di una matrice simmetrica che sfrutta i risultati citati sui valori di Ritz.

Supponiamo di voler cercare gli autovalori di una matrice A e di conoscere (θ, u) coppia di Ritz (approssimazione dell'autocoppia (λ, v) , con λ autovalore di modulo massimo) di A relativa ad sottospazio $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^n$.

Vogliamo cercare t tale che

$$A(u + t) = \lambda(u + t) \Rightarrow (A - \lambda I)t = -(A - \lambda I)u$$

Davidson propone di risolvere: $(D_A - \theta I)t = -r$ con $r = (A - \theta I)u$.

Il metodo di Davidson

Il metodo di Davidson è un metodo iterativo per il calcolo di alcuni autovalori estremali di una matrice simmetrica che sfrutta i risultati citati sui valori di Ritz.

Supponiamo di voler cercare gli autovalori di una matrice A e di conoscere (θ, u) coppia di Ritz (approssimazione dell'autocoppia (λ, v) , con λ autovalore di modulo massimo) di A relativa ad sottospazio $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}^n$.

Vogliamo cercare t tale che

$$A(u + t) = \lambda(u + t) \Rightarrow (A - \lambda I)t = -(A - \lambda I)u$$

Davidson propone di risolvere: $(D_A - \theta I)t = -r$ con $r = (A - \theta I)u$.

Il metodo di Davidson

Imporre $(u + t)$ autovettore relativo a λ autovalore di modulo massimo equivale a imporre $\rho(u + t) = \max_{c \in \mathbb{R}^n} \rho(c)$.

Sviluppando $\rho(x) = \frac{x^t A x}{x^t x}$ con Taylor al secondo ordine troviamo

$$\rho(u + t) \approx \rho(u) + t^t \nabla \rho(u) + \frac{1}{2} t^t H(u) t$$

e sia $r = (A - \rho(u)I)u$, allora

$$\nabla \rho(u) = \frac{2r}{u^t u} \quad H_{ij}(u) = \frac{2}{u^t u} \left(a_{ij} - \delta_{ij} \rho(u) - 2 \frac{u_i r_j + u_j r_i}{u^t u} \right)$$

Se $t = t_i e_i$, $t^t \nabla \rho(u) = \frac{2r_i}{u^t u} t_i$, $\frac{1}{2} t^t H(u) t = \frac{1}{u^t u} (a_{ii} - \rho(u) - 4 \frac{u_i r_i}{u^t u}) t_i^2$, e troviamo

$$t_i = -\frac{r_i}{a_{ii} - \rho(u) - 4 \frac{u_i r_i}{u^t u}} \xrightarrow{\text{sol approx}} t_i = -(a_{ii} - \rho(u))^{-1} r_i$$

Il metodo di Davidson

Imporre $(u + t)$ autovettore relativo a λ autovalore di modulo massimo equivale a imporre $\rho(u + t) = \max_{c \in \mathbb{R}^n} \rho(c)$.

Sviluppando $\rho(x) = \frac{x^t A x}{x^t x}$ con Taylor al secondo ordine troviamo

$$\rho(u + t) \approx \rho(u) + t^t \nabla \rho(u) + \frac{1}{2} t^t H(u) t$$

e sia $r = (A - \rho(u)I)u$, allora

$$\nabla \rho(u) = \frac{2r}{u^t u} \quad H_{ij}(u) = \frac{2}{u^t u} \left(a_{ij} - \delta_{ij} \rho(u) - 2 \frac{u_i r_j + u_j r_i}{u^t u} \right)$$

Se $t = t_i \mathbf{e}_i$, $t^t \nabla \rho(u) = \frac{2r_i}{u^t u} t_i$, $\frac{1}{2} t^t H(u) t = \frac{1}{u^t u} (a_{ii} - \rho(u) - 4 \frac{u_i r_i}{u^t u}) t_i^2$, e troviamo

$$t_i = -\frac{r_i}{a_{ii} - \rho(u) - 4 \frac{u_i r_i}{u^t u}} \xrightarrow{\text{Sol approx}} t_i = -(a_{ii} - \rho(u))^{-1} r_i$$

Algoritmo di Davidson

- (i) Scegli un vettore iniziale v
- (ii) Calcola $v_0 = \frac{v}{||v||}$, $V_0 = [v_0]$; $H = [v_0^* A v_0]$;
 $u = v_0, \theta = v_0^* A v_0, r = Au - \theta u$
- (iii) **for** $i = 1, \dots$
 - Trova $t = (D_A - \theta I)^{-1} r$
 - Ortogonalizza t rispetto a V_k ed espandi V_k a V_{k+1} con questo nuovo vettore
 - Calcola $V_{k+1}^* (A v_{k+1})$ per aggiornare l'ultima riga e l'ultima colonna di H
 - Calcola la più grande autocoppia (θ, s) di H
 - Calcola il vettore di Ritz $u = V_k s$ e il resto $r = Au - \theta u$
 - Test di convergenza
- (iv) **end**

Metodo delle Rotazioni di Jacobi

Scopo: ridurre la quantità $\text{off}(A) = \sqrt{\sum_{j \neq i} a_{ij}^2}$ di una matrice simmetrica A tramite trasformazioni unitarie $Q^* A Q$

Osserviamo che scelti $p \neq q$ esistono sempre c, s tali che

$$\begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{p,p} & a_{p,q} \\ a_{p,q} & a_{q,q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_p & 0 \\ 0 & b_q \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow$ scelta $J = J_{p,q}(c, s)$ otteniamo

$$\text{off}(J^* A J)^2 = \text{off}(A)^2 - 2a_{p,q} \stackrel{(1)}{\implies} \text{off}(J^* A J)^2 \leq \left(1 - \frac{2}{n^2 - n}\right) \text{off}(A)^2$$

(1) se $a_{p,q} \geq a_{i,j} \forall i \neq j$.

Metodo delle Rotazioni di Jacobi

Scopo: ridurre la quantità $\text{off}(A) = \sqrt{\sum_{j \neq i} a_{ij}^2}$ di una matrice simmetrica A tramite trasformazioni unitarie $Q^* A Q$

Osserviamo che scelti $p \neq q$ esistono sempre c, s tali che

$$\begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{p,p} & a_{p,q} \\ a_{p,q} & a_{q,q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_p & 0 \\ 0 & b_q \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow$ scelta $J = J_{p,q}(c, s)$ otteniamo

$$\text{off}(J^* A J)^2 = \text{off}(A)^2 - 2a_{p,q} \stackrel{(1)}{\implies} \text{off}(J^* A J)^2 \leq \left(1 - \frac{2}{n^2 - n}\right) \text{off}(A)^2$$

(1) se $a_{p,q} \geq a_{i,j} \forall i \neq j$.

Metodo delle Rotazioni di Jacobi

Scopo: ridurre la quantità $\text{off}(A) = \sqrt{\sum_{j \neq i} a_{ij}^2}$ di una matrice simmetrica A tramite trasformazioni unitarie $Q^* A Q$

Osserviamo che scelti $p \neq q$ esistono sempre c, s tali che

$$\begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{p,p} & a_{p,q} \\ a_{p,q} & a_{q,q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_p & 0 \\ 0 & b_q \end{bmatrix}$$

$\Rightarrow$ scelta $J = J_{p,q}(c, s)$ otteniamo

$$\text{off}(J^* A J)^2 = \text{off}(A)^2 - 2a_{p,q} \stackrel{(1)}{\implies} \text{off}(J^* A J)^2 \leq \left(1 - \frac{2}{n^2 - n}\right) \text{off}(A)^2$$

(1) se $a_{p,q} \geq a_{i,j} \forall i \neq j$.

JOCC

Supponiamo che A sia fortemente dominante diagonale con $\alpha = a_{11} > a_{ii} \forall i$.

→ (α, e_1) approssimazione dell'autocoppia più grande di A .

Idea: cercare la correzione $t = \begin{pmatrix} 0 & z \end{pmatrix}^t$ dell'autovettore in $e_1^\perp$, in modo che $e_1 + t = \begin{pmatrix} 1 & z \end{pmatrix}^t$ sia autovettore della matrice A e risolvere il problema degli autovalori come un sistema lineare.

Posto $A = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix}$, vogliamo risolvere:

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix}$$

JOCC

Supponiamo che A sia fortemente dominante diagonale con $\alpha = a_{11} > a_{ii} \forall i$.

→ (α, e_1) approssimazione dell'autocoppia più grande di A .

Idea: cercare la correzione $t = \begin{pmatrix} 0 & z \end{pmatrix}^t$ dell'autovettore in $e_1^\perp$, in modo che $e_1 + t = \begin{pmatrix} 1 & z \end{pmatrix}^t$ sia autovalore della matrice A e risolvere il problema degli autovalori come un sistema lineare.

Posto $A = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix}$, vogliamo risolvere:

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix}$$

JOCC

Supponiamo che A sia fortemente dominante diagonale con $\alpha = a_{11} > a_{ii} \forall i$.

→ (α, e_1) approssimazione dell'autocoppia più grande di A .

Idea: cercare la correzione $t = \begin{pmatrix} 0 & z \end{pmatrix}^t$ dell'autovettore in $e_1^\perp$, in modo che $e_1 + t = \begin{pmatrix} 1 & z \end{pmatrix}^t$ sia autovalore della matrice A e risolvere il problema degli autovalori come un sistema lineare.

Posto $A = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix}$, vogliamo risolvere:

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix}$$

JOCC - Risoluzione del sistema

Posto $A = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix}$, vogliamo risolvere:

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix}$$

Cioè il sistema che vogliamo risolvere è:

$$\begin{cases} \lambda = \alpha + b^T z \\ c + Fz = \lambda z \end{cases} \implies \begin{cases} \lambda = \alpha + b^T z \\ (F - \lambda I)z = -c \end{cases}$$

Che può essere risolto iterativamente una volta riscritto come

$$\begin{cases} \theta_k = \alpha + b^T z_k \\ (D_F - \theta_k I)z_{k+1} = (D_F - F)z_k - c \end{cases}$$

JOCC - Risoluzione del sistema

Posto $A = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix}$, vogliamo risolvere:

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix}$$

Cioè il sistema che vogliamo risolvere è:

$$\begin{cases} \lambda = \alpha + b^T z \\ c + Fz = \lambda z \end{cases} \implies \begin{cases} \lambda = \alpha + b^T z \\ (F - \lambda I)z = -c \end{cases}$$

Che può essere risolto iterativamente una volta riscritto come

$$\begin{cases} \theta_k = \alpha + b^T z_k \\ (D_F - \theta_k I)z_{k+1} = (D_F - F)z_k - c \end{cases}$$

JOCC - Risoluzione del sistema

Posto $A = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix}$, vogliamo risolvere:

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & b^t \\ c & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} 1 \\ z \end{bmatrix}$$

Cioè il sistema che vogliamo risolvere è:

$$\begin{cases} \lambda = \alpha + b^T z \\ c + Fz = \lambda z \end{cases} \implies \begin{cases} \lambda = \alpha + b^T z \\ (F - \lambda I)z = -c \end{cases}$$

Che può essere risolto iterativamente una volta riscritto come

$$\begin{cases} \theta_k = \alpha + b^T z_k \\ (D_F - \theta_k I)z_{k+1} = (D_F - F)z_k - c \end{cases}$$

Metodo di Davidson: un JOCC accelerato

Supponiamo di essere a k -esimo passo del metodo di Davidson e di JOCC, $u_k = \begin{pmatrix} 1 & z_k \end{pmatrix}^t$, e θ_k :

$$r_k = (A - \theta_k I)u_k = \begin{bmatrix} \alpha - \theta & b^t \\ c & F - \theta I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ z_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha - \theta + b^t z_k \\ c + (F - \theta I)z_k \end{bmatrix}$$

Con il metodo di Davidson calcoliamo t_k da:

$$(D_A - \theta I)t_k = \begin{bmatrix} \alpha - \theta & 0 \\ 0 & D_F - \theta I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ y_k \end{bmatrix} = -r_k \text{ ovvero}$$

$$(D_F - \theta I)y_k = -(F - \theta I)z_k - c \iff (D_F - \theta I)(y_k + z_k) = (D_F - F)z_k - c$$

Metodo di Davidson: un JOCC accelerato

Supponiamo di essere a k -esimo passo del metodo di Davidson e di JOCC, $u_k = \begin{pmatrix} 1 & z_k \end{pmatrix}^t$, e θ_k :

$$r_k = (A - \theta_k I)u_k = \begin{bmatrix} \alpha - \theta & b^t \\ c & F - \theta I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ z_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha - \theta + b^t z_k \\ c + (F - \theta I)z_k \end{bmatrix}$$

Con il metodo di Davidson calcoliamo t_k da:

$$(D_A - \theta I)t_k = \begin{bmatrix} \alpha - \theta & 0 \\ 0 & D_F - \theta I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ y_k \end{bmatrix} = -r_k \text{ ovvero}$$

$$(D_F - \theta I)y_k = -(F - \theta I)z_k - c \iff (D_F - \theta I)(y_k + z_k) = (D_F - F)z_k - c$$

Outline

- 1 Metodi per il calcolo degli autovalori
 - Quoziente di Rayleigh-Ritz
 - Il metodo di Davidson
 - I metodi di Jacobi
- 2 Il nuovo metodo Jacobi-Davidson
 - Presentazione del metodo
 - L'algoritmo
 - Risoluzione dell'equazione di Jacobi-Davidson
- 3 Convergenza

Il metodo iterativo

$A \in \mathbb{C}^{n \times n}$: supponiamo di conoscere V_m base ortogonale di un sottospazio $\mathcal{K}_m$ e (θ, u) coppia di Ritz di A relativa a $\mathcal{K}$. In particolare:

$$\theta = u^* A u$$

Idea: trovare la correzione v per cui $u + v$ è autovettore di A in $u^\perp$.

Indichiamo con $B = (I - uu^*)A(I - uu^*)$ la proiezione della matrice A su $u^\perp$: vale

$$A = B + Auu^* + uu^*A - \theta uu^*$$

Il problema da risolvere è:

$$\begin{aligned} A(u + v) &= \lambda(u + v) \text{ con } v \perp u \\ (A - \lambda I)v &= -(A - \lambda I)u \text{ con } v \perp u \end{aligned} \tag{3}$$

Il metodo iterativo

$A \in \mathbb{C}^{n \times n}$: supponiamo di conoscere V_m base ortogonale di un sottospazio $\mathcal{K}_m$ e (θ, u) coppia di Ritz di A relativa a $\mathcal{K}$. In particolare:

$$\theta = u^* A u$$

Idea: trovare la correzione v per cui $u + v$ è autovettore di A in $u^\perp$.

Indichiamo con $B = (I - uu^*)A(I - uu^*)$ la proiezione della matrice A su $u^\perp$: vale

$$A = B + Auu^* + uu^*A - \theta uu^*$$

Il problema da risolvere è:

$$\begin{aligned} A(u + v) &= \lambda(u + v) \text{ con } v \perp u \\ (A - \lambda I)v &= -(A - \lambda I)u \text{ con } v \perp u \end{aligned} \tag{3}$$

L'equazione di Jacobi-Davidson

Osserviamo che da $A = B + Auu^* + uu^*A - \theta uu^*$ ricaviamo

$$Av = Bv + Auu^*v + uu^*Av - \theta uu^*v = Bv + u^*Avu \text{ per } v \perp u$$

Poniamo $r = Au - \theta u$: $r \perp u$

Sostituendo nell'equazione 3

$$(A - \lambda I)v = -(A - \lambda I)u \iff (B - \lambda I)v = -r + (\lambda - \theta - u^*Av)u$$

$$\text{per } v \perp u \Rightarrow \lambda - \theta - u^*Av = 0 \Rightarrow (B - \lambda I)v = -r$$

Questo porta all'equazione di Jacobi-Davidson

$$(B - \theta I)t = -r \text{ con } t \perp u \text{ o equiv.}$$

$$(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r \text{ con } t \perp u \quad (4)$$

L'equazione di Jacobi-Davidson

Osserviamo che da $A = B + Auu^* + uu^*A - \theta uu^*$ ricaviamo

$$Av = Bv + Auu^*v + uu^*Av - \theta uu^*v = Bv + u^*Avu \text{ per } v \perp u$$

Poniamo $r = Au - \theta u$: $r \perp u$

Sostituendo nell'equazione 3

$$(A - \lambda I)v = -(A - \lambda I)u \iff (B - \lambda I)v = -r + (\lambda - \theta - u^*Av)u$$

$$\text{per } v \perp u \Rightarrow \lambda - \theta - u^*Av = 0 \Rightarrow (B - \lambda I)v = -r$$

Questo porta all'*equazione di Jacobi-Davidson*

$$(B - \theta I)t = -r \text{ con } t \perp u \text{ o equiv.}$$

$$(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r \text{ con } t \perp u \quad (4)$$

L'equazione di Jacobi-Davidson

Osserviamo che da $A = B + Auu^* + uu^*A - \theta uu^*$ ricaviamo

$$Av = Bv + Auu^*v + uu^*Av - \theta uu^*v = Bv + u^*Avu \text{ per } v \perp u$$

Poniamo $r = Au - \theta u$: $r \perp u$

Sostituendo nell'equazione 3

$$(A - \lambda I)v = -(A - \lambda I)u \iff (B - \lambda I)v = -r + (\lambda - \theta - u^*Av)u$$

$$\text{per } v \perp u \Rightarrow \lambda - \theta - u^*Av = 0 \Rightarrow (B - \lambda I)v = -r$$

Questo porta all'*equazione di Jacobi-Davidson*

$$(B - \theta I)t = -r \text{ con } t \perp u \text{ o equiv.}$$

$$(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r \text{ con } t \perp u \quad (4)$$

-
- (i) Scegli un vettore iniziale v
 - (ii) Inizializza v_0 , V , H e trova la prima coppia (θ, u)
 - (iii) **for** $i = 1, \dots$
 - Risolvi l'equazione

$$(I - uv^*)(A - \theta T)(I - uv^*)i = -r$$
 con $i \perp u$
 - Estendi la base V
 - Aggiorna H
 - Calcola l'autocoppia di Ritz (θ_i, u) di H
 - $\|r\| = \|Ae - \theta u\|$. Test di convergenza
 - (iv) **end**

- (i) Scegli un vettore iniziale v
- (ii) Inizializza v_0 , V , H e trova la prima coppia (θ, u)
- (iii) for $i = 1, \dots$
 - 1. risolvi l'equazione

$$(A - H)V = (A - H)v_0 + (A - H)u$$
 - 2. trova la coppia (θ_i, u_i) di Ritz

$$(A - H)v_0 + (A - H)u_i = \theta_i (A - H)v_0 + \theta_i (A - H)u_i$$
 - 3. aggiorna v_0 e V

$$v_0 = \frac{v_0 + u_i}{\|v_0 + u_i\|}$$

$$V = [v_0, \dots, v_{i-1}]$$
 - 4. aggiorna H

$$H = V^* A V$$
- (iv) end

Ad ogni passo:

- V è una base ortonormale del sottospazio $\mathcal{K}$ considerato
- $H = V^* A V$ è la proiezione della matrice A su $\mathcal{K}$.

Inizializza:

$$v_0 = \frac{v}{\|v\|};$$

$$V = v_0;$$

$$H = v_0^* A v_0.$$

La prima coppia di Ritz è $(v_0^* A v_0, v_0)$.

-
- (i) Scegli un vettore iniziale v
- (ii) Inizializza v_0 , V , H e trova la prima coppia (θ, u)
- (iii) **for** $i = 1, \dots$
- Risolvi l'equazione
 $(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r$
con $t \perp u$.
 - Espandi la base V
 - Aggiorna H
 - Calcola l'autocoppia di Ritz
 (θ, u) di A
 - $\|r\| = \|Au - \theta u\|$: Test di
convergenza
- (iv) **end**

- (i) Scegli un vettore iniziale v
- (ii) Inizializza v_0 , V , H e trova la prima coppia (θ, u)
- (iii) **for** $i = 1, \dots$
 - Risolvi l'equazione

$$(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r$$
 con $t \perp u$.
 - Espandi la base V
 - Aggiorna H
 - Calcola l'autocoppia di Ritz (θ, u) di A
 - $\|r\| = \|Au - \theta u\|$: Test di convergenza

(iv) **end**

Vedremo più avanti tecniche risolutive di questa equazione:

- Risoluzione esatta
- Risoluzione approssimata con GMRES
- Risoluzione approssimata risolvendo in maniera esatta l'equazione preconditionata

- (i) Scegli un vettore iniziale v
- (ii) Inizializza v_0 , V , H e trova la prima coppia (θ, u)
- (iii) **for** $i = 1, \dots$
 - Risolvi l'equazione
$$(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r$$
con $t \perp u$.
 - Espandi la base V
 - Aggiorna H
 - Calcola l'autocoppia di Ritz (θ, u) di A
 - $\|r\| = \|Au - \theta u\|$: Test di convergenza
- (iv) **end**

Ortogonalizza t rispetto a V ottenendo un nuovo vettore v_{k+1} .

Lo spazio $\mathcal{K}$ esteso con v_{k+1} ha come base ortonormale $V = [V, v_{k+1}]$.

- (i) Scegli un vettore iniziale v
- (ii) Inizializza v_0 , V , H e trova la prima coppia (θ, u)
- (iii) **for** $i = 1, \dots$
 - Risolvi l'equazione $(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r$ con $t \perp u$.
 - Espandi la base V
 - **Aggiorna** H
 - Calcola l'autocoppia di Ritz (θ, u) di A
 - $\|r\| = \|Au - \theta u\|$: Test di convergenza

(iv) **end**

Ad ogni passo vogliamo
 $H = V^*AV$: basta aggiornare
 l'ultima riga e l'ultima colonna
 di H con

$$V^*Av_{k+1}$$

- (iv) **end**

La coppia di Ritz di A relativa a $\mathcal{K}$ è

(θ, V_s)

-
- (i) Scegli un vettore iniziale v
- (ii) Inizializza v_0 , V , H e trova la prima coppia (θ, u)
- (iii) **for** $i = 1, \dots$
- Risolvi l'equazione
$$(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r$$
con $t \perp u$.
 - Espandi la base V
 - Aggiorna H
 - Calcola l'autocoppia di Ritz (θ, u) di A
 - $\|r\| = \|Au - \theta u\|$: Test di convergenza
- (iv) **end**

Risoluzione esatta

Vogliamo risolvere

$$(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r \text{ con } t \perp u$$

Osserviamo che $(I - uu^*)t = t \Rightarrow (A - \theta I)t + \epsilon u = -r$, dove ϵ è tale che $t \perp u$.

Quindi equivale a risolvere il sistema

$$\begin{bmatrix} A - \theta I & u \\ u^* & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ \epsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -r \\ 0 \end{bmatrix}$$

Risoluzione esatta

Vogliamo risolvere

$$(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r \text{ con } t \perp u$$

Osserviamo che $(I - uu^*)t = t \Rightarrow (A - \theta I)t + \epsilon u = -r$, dove ϵ è tale che $t \perp u$.

Quindi equivale a risolvere il sistema

$$\begin{bmatrix} A - \theta I & u \\ u^* & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ \epsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -r \\ 0 \end{bmatrix}$$

Risoluzione dell'equazione esatta con preconditionatore

In certi casi (per $\theta \approx \lambda$) la matrice precedente è molto mal condizionata: quindi data $M \approx (A - \theta I)$ invertibile, possiamo risolvere

$$(I - uu^*)M(I - uu^*)t = -r \Rightarrow t = \epsilon M^{-1}u - M^{-1}r$$

dove

$$\epsilon = \frac{u^* M^{-1} r}{u^* M^{-1} u}$$

è il fattore di correzione.

Ad esempio, per matrici FDD useremo $M = D_A - \theta I$.

Risoluzione dell'equazione esatta con preconditionatore

In certi casi (per $\theta \approx \lambda$) la matrice precedente è molto mal condizionata: quindi data $M \approx (A - \theta I)$ invertibile, possiamo risolvere

$$(I - uu^*)M(I - uu^*)t = -r \Rightarrow t = \epsilon M^{-1}u - M^{-1}r$$

dove

$$\epsilon = \frac{u^* M^{-1} r}{u^* M^{-1} u}$$

è il fattore di correzione.

Ad esempio, per matrici FDD useremo $M = D_A - \theta I$.

Risoluzione approssimata dell'equazione

Risoluzione dell'equazione $[(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)]t = -r$ con il GMRES

Sappiamo che le soluzioni apparterranno al sottospazio $\mathcal{K}_m(C, r) = \{r, Cr, \dots, C^{m-1}r\}$. Osserviamo che $r \perp u$ e supponendo $u^*C^{k-1}r = 0$

$$\begin{aligned}u^*C^k r &= u^*(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)C^{k-1}r \\&= u^*(I - uu^*)(A - \theta I)C^{k-1}r \\&= u^*(I - uu^*)AC^{k-1}r = u^*AC^{k-1}r - u^*AC^{k-1}r = 0\end{aligned}$$

quindi $u^*C^k r = 0 \forall k$ per induzione.

Ma allora $s \in \mathcal{K}_m(C, r) = \{r, Cr, \dots, C^{m-1}r\} \subset u^\perp$.

Risoluzione approssimata dell'equazione

Risoluzione dell'equazione $[(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)]t = -r$ con il GMRES

Sappiamo che le soluzioni apparterranno al sottospazio $\mathcal{K}_m(C, r) = \{r, Cr, \dots, C^{m-1}r\}$. Osserviamo che $r \perp u$ e supponendo $u^*C^{k-1}r = 0$

$$\begin{aligned}u^*C^k r &= u^*(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)C^{k-1}r \\&= u^*(I - uu^*)(A - \theta I)C^{k-1}r \\&= u^*(I - uu^*)AC^{k-1}r = u^*AC^{k-1}r - u^*AC^{k-1}r = 0\end{aligned}$$

quindi $u^*C^k r = 0 \forall k$ per induzione.

Ma allora $s \in K_m(C, r) = \{r, Cr, \dots, C^{m-1}r\} \subset u^\perp$.

Outline

- 1 Metodi per il calcolo degli autovalori
 - Quoziente di Rayleigh-Ritz
 - Il metodo di Davidson
 - I metodi di Jacobi

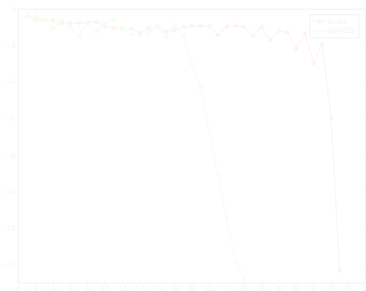
- 2 Il nuovo metodo Jacobi-Davidson
 - Presentazione del metodo
 - L'algoritmo
 - Risoluzione dell'equazione di Jacobi-Davidson

- 3 Convergenza

Alcuni risultati

Se l'equazione è risolta in maniera esatta: **convergenza quadratica**
(cubica nel caso Hermitiano)

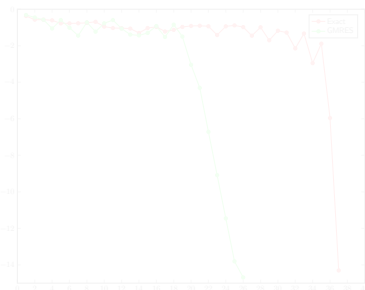
Se l'equazione è risolta in maniera approssimata: **convergenza veloce**
è mantenuta



Alcuni risultati

Se l'equazione è risolta in maniera esatta: **convergenza quadratica**
(cubica nel caso Hermitiano)

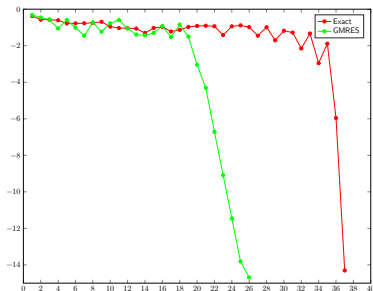
Se l'equazione è risolta in maniera approssimata: **convergenza veloce**
è mantenuta



Alcuni risultati

Se l'equazione è risolta in maniera esatta: **convergenza quadratica**
(cubica nel caso Hermitiano)

Se l'equazione è risolta in maniera approssimata: **convergenza veloce**
è mantenuta



Il caso di una matrice FDD

$A = D_A + E$ con $\|E\|_\infty \ll \|D_A\|_\infty$ e $a_{1,1}$ elemento diagonale di modulo massimo. Allora: $u_k = e_1 + f$,

$$(r)_1 = (Au - \theta u)_1 = (a_{1,1} - \theta)(1 + (f)_1) + (Eu_k)_1$$

$$(r)_i = (a_{i,i} - \theta)(f)_i + (Eu_k)_i$$

Quindi

$$t_D = (D_A - \theta I)^{-1}r = (e_1 + f) + (D_A - \theta I)^{-1}(Eu_k)$$

$$t_{JD} = \epsilon(D_A - \theta I)^{-1}u - (D_A - \theta I)^{-1}r \text{ dove}$$

$$\|\epsilon(D_A - \theta I)^{-1}u\|_2 \leq \left\| \frac{u^*(D_A - \theta I)^{-1}r}{u^*(D_A - \theta I)^{-1}u} \right\| \|(D_A - \theta I)^{-1}u\| \quad (5)$$

$$\lesssim \frac{\|u\| \|(D_A - \theta I)^{-1}r\|}{\|u\| \|(D_A - \theta I)^{-1}u\|} \|(D_A - \theta I)^{-1}u\| \quad (6)$$

Il caso di una matrice FDD

$A = D_A + E$ con $\|E\|_\infty \ll \|D_A\|_\infty$ e $a_{1,1}$ elemento diagonale di modulo massimo. Allora: $u_k = e_1 + f$,

$$\begin{aligned}(r)_1 &= (Au - \theta u)_1 = (a_{1,1} - \theta)(1 + (f)_1) + (Eu_k)_1 \\ (r)_i &= (a_{i,i} - \theta)(f)_i + (Eu_k)_i\end{aligned}$$

Quindi

$$t_D = (D_A - \theta I)^{-1}r = (e_1 + f) + (D_A - \theta I)^{-1}(Eu_k)$$

$$t_{JD} = \epsilon(D_A - \theta I)^{-1}u - (D_A - \theta I)^{-1}r \text{ dove}$$

$$\|\epsilon(D_A - \theta I)^{-1}u\|_2 \leq \left\| \frac{u^*(D_A - \theta I)^{-1}r}{u^*(D_A - \theta I)^{-1}u} \right\| \|(D_A - \theta I)^{-1}u\| \quad (5)$$

$$\lesssim \frac{\|u\| \|(D_A - \theta I)^{-1}r\|}{\|u\| \|(D_A - \theta I)^{-1}u\|} \|(D_A - \theta I)^{-1}u\| \quad (6)$$