

# Risoluzioni di problemi agli autovalori con variazioni del metodo di Arnoldi

Luigina Mazzone

25 ottobre 2022

## 1 Introduzione

In questo seminario andremo ad analizzare alcune variazioni del metodo di Arnoldi applicate a matrici di grandi dimensioni. Consideriamo pertanto una matrice  $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ : il nostro obiettivo è quello di trovare autovalori vicini ad un punto 'target'  $\tau$ . Questo tipo di problema nasce ad esempio in fluidodinamica computazionale in cui la matrice  $A$  non è fattorizzabile. Il nostro obiettivo è quindi quello di cercare  $k$  autocopie fra le  $N$  di tipo  $(\lambda_i, \phi_i)$  al variare di  $i = 1, \dots, N$  nelle quali il valore di  $\lambda_i$  si avvicina maggiormente a quello di  $\tau$ . Questo seminario è strutturato in quattro parti: nella sezione 2.1 andremo a introdurre il primo algoritmo e la sua variante, nella sezione 2.2 presentiamo un metodo di tipo Arnoldi e una sua variante, nella sezione 3 presenteremo alcuni risultati numerici e ci sarà infine una sezione conclusiva.

Per quanto riguarda la notazione, la norma  $\|\cdot\|$  rappresenterà la norma euclidea, il simbolo  $(\cdot, \cdot)$  il prodotto scalare euclideo e il simbolo  $A^H$  denota la trasposta coniugata della matrice  $A$ .

## 2 Cenni teorici

Il metodo di Rayleigh-Ritz è adatto a trovare autovalori estremali, ragion per cui sarebbe ideale usare la matrice  $(A - \tau I)^{-1}$  e applicare a questa l'algoritmo di Rayleigh-Ritz, un metodo di proiezione ortogonale.

Diamo una breve descrizione di un generico metodo di proiezione ortogonale secondo [Saa11]: Sia  $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$  e  $\mathcal{K}$  di dimensione  $m \ll N$ . Come convenzione notazionale indichiamo con  $A$  sia la matrice che l'applicazione lineare che rappresenta. Consideriamo il problema agli autovalori

$$Au = \lambda u$$

Un metodo di proiezione ortogonale computa delle approssimazioni  $(\tilde{\lambda}, \tilde{u})$  con  $\tilde{\lambda} \in \mathbb{C}$  e  $\tilde{u} \in \mathbb{C}^N$  in maniera che sia soddisfatta la condizione di Petrov Galerkin:

$$A\tilde{u} - \tilde{\lambda}\tilde{u} \perp \mathcal{K}$$

o, equivalentemente,

$$(A\tilde{u} - \tilde{\lambda}\tilde{u}, v) = 0, \forall v \in \mathcal{K}$$

.

Assumendo di avere a disposizione una base ortonormale  $\{v_1, \dots, v_m\}$  dello spazio  $\mathcal{K}$ , chiamando  $V_m$  la matrice con colonne  $\{v_1, \dots, v_m\}$ , la condizione può essere riscritta come:

$$\begin{cases} \tilde{u} = V_m y \\ B_m y = \tilde{\lambda} y \end{cases}$$

Con  $B_m = V_m^H A V_m$ .

## 2.1 Metodo armonico di Rayleigh-Ritz

Presentiamo quindi l'algoritmo di Rayleigh Ritz che andremo a implementare:

Sia  $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$  e sia  $V \in \mathbb{C}^{N \times m}$  la matrice le cui colonne formano una base ortonormale del sottospazio  $\mathcal{V}$  di dimensione  $m \ll N$ .

1. Computo la matrice  $V^H A V$  di dimensione  $m \times m$
2. Risolvo il problema agli autovalori  $V^H A V y_i = \mu_i y_i$
3. Computo il vettore di Ritz  $\phi_i = V y_i$  e l'autovalore di Ritz  $\lambda_i = \mu_i$

Se il sottospazio  $\mathcal{V}$  contiene  $k \leq m$  buone approssimazioni di alcuni autovettori di  $A$ , questo metodo fornisce in output queste approssimazioni e le approssimazioni dei rispettivi autovalori. Il residuo  $\|A\phi_i - \lambda_i \phi_i\|$  determina l'accuratezza dell'approssimazione.

In questo seminario andremo a considerare come sottospazio  $\mathcal{V}$ , il sottospazio di Krylov della matrice  $A$ .

**Definizione 2.1** (Spazio di Krylov). *Lo spazio di dimensione  $m$  generato dalla matrice  $A$  e da un qualsiasi vettore  $v$  di lunghezza unitaria  $K_m(A, v) = \text{span}\{v, Av, A^2v, \dots, A^{m-1}v\}$  è chiamato "Spazio di Krylov (della matrice  $A$  di dimensione  $m$ )".*

Chiaramente,  $K_m(A, v)$  ha dimensione al più  $m$ , potrebbe essere più bassa nel caso in cui  $v$  sia contenuto in qualche sottospazio invariante di  $A$ .

D'ora in poi considereremo  $\mathcal{V} = K_m(A, v)$ .

Idealmente, vorremo applicare questo metodo alla matrice  $(A - \tau I)^{-1}$ , poichè è facile notare che i suoi autovalori maggiori in modulo corrisponderanno agli autovalori di  $A$  più vicini al punto target  $\tau$ .

Introduciamo pertanto l'idea alla base del metodo armonico di Rayleigh Ritz: Consideriamo uno spazio  $\mathcal{V}$  di dimensione  $m$ , definiamo lo spazio  $\mathcal{W} = (A - \tau I)\mathcal{V}$ . Secondo la definizione in [Saa11], il metodo armonico di Rayleigh-Ritz cerca delle approssimazioni delle autocoppie  $(\tilde{\lambda}_i, \tilde{\phi}_i)$  che soddisfino la condizione:

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_i \in \mathcal{V} \\ A\tilde{\phi}_i - \tilde{\lambda}_i \tilde{\phi}_i \perp \mathcal{W} \end{cases} \quad (1)$$

Si nota con alcune sostituzioni che questo sistema è equivalente al sistema:

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_i \in \mathcal{V} \\ (A - \tau I)^{-1} \tilde{\phi}_i - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} \tilde{\phi}_i \perp (A - \tau I)^H \mathcal{W} \end{cases} \quad (2)$$

Se infatti, consideriamo  $\mathcal{V} = K_m(A, v)$ , gli autovalori di Ritz della matrice  $(A - \tau I)$  rispetto allo spazio  $K_m(A, v)$  sono i reciproci degli autovalori di Ritz della matrice  $(A - \tau I)^{-1}$  rispetto allo spazio  $(A - \tau I)^H \mathcal{W}$ . Tuttavia, la trasposta coniugata di  $A$  potrebbe non essere disponibile e inoltre il metodo necessita di due prodotti matrici-vettore ad ogni passo.

### 2.1.1 Implementazione del metodo armonico

Il metodo di Arnoldi [Saa11] è usato per trovare una base ortonormale  $\{v_i\}_{i=1, \dots, m}$  dello spazio di Krylov  $K_m(A, v_1)$ . Il processo può essere scritto in forma matriciale come:

$$A V_m = V_m H_m + h_{m+1, m} v_{m+1} e_m^H = V_{m+1} \tilde{H}_m \quad (3)$$

dove  $V_{m+1} = (V_m, v_{m+1}) = (v_1, \dots, v_m, v_{m+1})$  e  $\tilde{H}_m$  è la matrice di Hessenberg superiore di dimensione  $(m+1) \times m$  identica alla matrice  $H_m$  con l'aggiunta di una riga il cui unico elemento non nullo è l'elemento  $h_{m+1,m}$ . Vogliamo quindi computare l'autocoppia  $(\tilde{\lambda}_i, \tilde{\phi}_i)$  che soddisfa

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_i \in \mathcal{V} \\ A\tilde{\phi}_i - \tilde{\lambda}_i \tilde{\phi}_i \perp \mathcal{W} \end{cases} \quad (4)$$

Sfruttando ora l'eq (3) e l'equivalenza tra (1) e (2), otteniamo il seguente sistema:

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_i = V_m z_i \\ (H_m - \tau I_m)^H z_i = \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} (\tilde{H}_m - \tau \tilde{I}_m)^H (\tilde{H}_m - \tau \tilde{I}_m) z_i \end{cases} \quad (5)$$

dove  $\tilde{I}_m$  è la matrice  $(m+1) \times m$  identica all'identità con l'aggiunta di una riga nulla. Presentiamo quindi la seguente Proposizione [XW13]:

**Proposizione 2.0.1.** *Supponiamo  $\lambda_i \neq \tau$ , allora l'autocoppia di Ritz  $(\phi_i, \lambda_i)$  è un'autocoppia di  $A$  se e solo se  $\phi_i \in AK_m(A, v)$  i.e.  $(I - P_{V_{m+1}})\phi_i = 0$ , dove  $P_{V_{m+1}}$  è l'operatore di proiezione ortogonale sul sottospazio generato dalle colonne di  $V_{m+1}$*

*Dimostrazione.*

$$\begin{aligned} A\phi_i - \lambda_i \phi_i &= (A - \tau I)V_m z_i - (\lambda_i - \tau)V_m z_i = \\ &= V_{m+1}(\tilde{H}_m - \tau \tilde{I}_m)z_i - (\lambda_i - \tau)V_m z_i = \\ &= V_{m+1}V_{m+1}^H(A - \tau I)V_m z_i - (\lambda_i - \tau)V_m z_i = \\ &= V_{m+1}V_{m+1}^H(A - \lambda_i I)\phi_i - (I - V_{m+1}V_{m+1}^H)(\lambda_i - \tau)\phi_i = \\ &= -(I - V_{m+1}V_{m+1}^H)(\lambda_i - \tau)\phi_i = \\ &= (\tau - \lambda_i)(I - P_{V_{m+1}})\phi_i. \end{aligned}$$

□

La convergenza dei vettori di Ritz  $\phi_i^{(m)}$  all'aumentare del parametro  $m$  non è sempre garantita [Ste01], motivo per cui introduciamo i vettori di Ritz armonici.

**Definizione 2.2** (Vettore "rifinito" di Ritz armonico). *Sia  $\tilde{\lambda}_i$  un autovalore di Ritz associato allo spazio  $K_m(A, v)$ . Un autovettore di Ritz armonico "rifinito" è un vettore  $\tilde{u}_i$  tale che*

$$\|(A - \tilde{\lambda}_i I)\tilde{u}_i\| = \min \|(A - \tilde{\lambda}_i I)u\|$$

$$\text{con } u \in K_m(A, v), \|u\| = 1$$

Per introdurre un teorema sulla convergenza del metodo usando vettori di Ritz "rifiniti", diamo prima la definizione di rappresentazione spettrale:

**Teorema 2.1.** *Sia  $(l_1, x_1)$  un'autocoppia unitaria di  $A$  e sia  $(x_1, y_2)$  unitaria tale che:*

$$\begin{pmatrix} x_1^H \\ y_2^H \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} x_1 & y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_1 & H \\ 0 & l_2 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

*Allora esiste una matrice  $Q$  che soddisfa l'equazione di Sylvester*

$$l_1 Q - Q l_2 = -H$$

*tale che se poniamo:*

$$X = (x_1, x_2), Y = (y_1, y_2)$$

*dove*

$$x_2 = y_2 + x_1 Q, y_1 = x_1 - y_2 Q^H$$

allora

$$Y^H X = I \text{ e } Y^H A X = \text{diag}(l_1, l_2). \quad (7)$$

Da (7) ricaviamo infine:

**Definizione 2.3** (Rappresentazione spettrale di  $A$ ).

$$A = x_1 l_1 y_1^H + x_2 l_2 y_2^H. \quad (8)$$

Mostriamo quindi un teorema sulla convergenza di un vettore "rifinito" di Ritz [Ste01]. In questo teorema, i valori di Ritz saranno indicati con  $\mu_\theta$  e dipenderanno cioè dal parametro  $\theta = \angle(x, V)$ , dove  $x$  è l'autovettore approssimato e  $V$  rappresenta la matrice formata dai vettori della base ortonormale di  $K_m(A, v)$ .

**Teorema 2.2.** *Sia*

$$A = \lambda x y^H + X L Y^H$$

la rappresentazione spettrale di  $A$  dove  $\|x\| = 1$  e  $Y$  è ortonormale. Sia  $\mu_\theta$  un autovalore di Ritz e  $x_\theta$  il suo vettore di Ritz corrispondente. Se  $\text{sep}(\lambda, L) - |\mu_\theta - \lambda| > 0$ , allora:

$$\sin \angle(x, x_\theta) \leq \frac{\|(A - \mu_\theta I) \sin \theta + |\lambda - \mu_\theta|\|}{\sqrt{1 - \sin^2 \theta (\text{sep}(\lambda, L) - |\mu_\theta - \lambda|)}}. \quad (9)$$

$$\text{Dove } \text{sep}(\lambda, L) = \|(\lambda I - M)^{-1}\|^{-1}.$$

Secondo il Corollario 4.5 [Ste01], i valori di Ritz convergono, perciò  $|\mu_\theta - \lambda| \rightarrow 0$ . Si osserva inoltre che la convergenza ha luogo per  $\theta \rightarrow 0$ .

Dunque con questo Teorema mostriamo che la convergenza degli autovettori di Ritz "rifiniti", a differenza dei normali vettori di Ritz, è garantita.

## 2.2 Metodo di tipo Arnoldi

Introduciamo ora un metodo per evitare di formare in maniera esplicita la matrice  $(A - \tau I)^{-1}$ , matematicamente equivalente ad applicare il metodo di Arnoldi alla matrice  $(A - \tau I)^{-1}$  sullo spazio di Krylov  $\mathcal{W} = (A - \tau I)K_m(A, v)$ . Per ogni vettore di lunghezza unitaria  $q_0 \in \mathbb{R}^n$ , possiamo costruire uno spazio di Krylov  $m$ -dimensionale  $\mathcal{U} = K_m(A, q_0)$ . Si dimostra facilmente che:

$$\mathcal{U} = \text{span}\{q_0, (A - \tau I)q_0, (A - \tau I)^2 q_0, \dots, (A - \tau I)^{m-1} q_0\}.$$

Consideriamo ora

$$\mathcal{Q} = \text{span}\{(A - \tau I)q_0, (A - \tau I)^2 q_0, \dots, (A - \tau I)^m q_0\}.$$

Notiamo che esiste un legame tra le basi ortonormali di questi due spazi, consideriamo cioè:

**Algoritmo 2.3.**

1. Inizializzo un vettore  $q_0$  tale che  $\|u\| = 1$ ;
2.  $r_{11} = \|(A - \tau I)q_0\|$ ,  $q_1 = \frac{(A - \tau I)q_0}{r_{11}}$ ;
3. per  $j = 1, \dots, m - 1$   
 $z = (A - \tau I)q_j$ ;
4. per  $i = 1, \dots, j$   
 $g_{ij} = (z, q_i)$   
 $z = z - g_{ij}q_i$   
end

$$5. \ g_{j+1,j} = \|z\|$$

$$6. \ q_{j+1} = z/g_{j+1,j} \\ \text{end}$$

Questo algoritmo mette in evidenza questa relazione:

$$(A - \tau I)U_m = Q_m R_m. \quad (10)$$

Dove  $U_m = (q_0, \dots, q_{m-1})$  e  $Q_m = (q_1, \dots, q_m)$  e

$$R_m = (r_{ij}) = \begin{pmatrix} r_{11} & G_{m-1} \\ 0 & g_{m,m-1} e_{m-1}^H \end{pmatrix} \quad (11)$$

Dove  $G_{m-1} = (g_{ij})_{(m-1) \times (m-1)}$  è una matrice di Hessenberg. Si mostra facilmente che i vettori  $q_1, \dots, q_m$  formano una base ortonormale di  $\mathcal{Q}$ .

Cerchiamo ora le autocopie  $(\tilde{\lambda}_i, \tilde{\phi}_i)$  con  $i = 1, \dots, m$  che soddisfino la proiezione ortogonale:

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_i \in \mathcal{Q} \\ (A - \tau I)^{-1} \tilde{\phi}_i - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} \tilde{\phi}_i \perp \mathcal{Q} \end{cases} \quad (12)$$

Consideriamo ora  $B_m = R_m(Q_m^H U_m)^{-1}$ . Da (10), notiamo che (12) è equivalente a:

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_i = Q_m y_i \\ B_m y_i = (\lambda_i - \tau) y_i \end{cases} \quad (13)$$

Il metodo di tipo Arnoldi infine sceglie  $k$  autocopie tra le  $m$  in output che meglio approssimano  $(\lambda_i, \phi_i)$

Possiamo riassumere l'algoritmo come:

**Algoritmo 2.4.** 1. Dato il numero  $k$  di autocopie desiderate e una tolleranza prescritta  $tol$ , inizializzo un vettore  $q_0$

2. Genero una base ortonormale di  $\mathcal{Q}$ : Uso l'algoritmo 1 per generare  $U_m, Q_m$  ed  $R_m$

3. Computo  $m$  approssimazioni delle autocopie usando il sistema (13) e ne selezioniamo  $k$

4. Test di convergenza: Calcolo le norme dei residui di  $(\tilde{\lambda}_i, \tilde{\phi}_i)$  con  $\eta_i = \frac{\|(A - \lambda_i I) \tilde{\phi}_i\|}{\|A\|_1}$  per  $i=1, \dots, k$ . Se sono tutte minori di  $Tol$  finisco, altrimenti continuo

5. Costruisco un nuovo vettore  $q_0$  e ricomincio dallo step 2

Supponiamo che la matrice  $R_m$  non sia singolare, la seguente proposizione mette in relazione i valori armonici di Ritz e le approssimazioni degli autovalori ottenuti dal metodo di tipo Arnoldi

**Proposizione 2.4.1.** Supponiamo che il metodo armonico computi valori armonici di Ritz  $\theta_i$ ,  $i = 1, \dots, m$  allora ho una permutazione  $j_1, \dots, j_m$  degli interni  $1, \dots, m$  tale che  $\tilde{\lambda}_i = \theta_{j_i}$

*Dimostrazione.* Supponiamo che le colonne di  $\hat{U}_m$  formino una base ortonormale di  $\mathcal{U}$ , allora ho che esiste una matrice non singolare  $D$  tale che

$$\hat{U}_m = U_m D. \quad (14)$$

Basandoci sulla procedura di Rayleigh-Ritz armonico è facile vedere che il quoziente armonico  $H$  di Rayleigh di  $A$  rispetto al sottospazio  $\mathcal{U}$  e la trasposizione  $\tau$  è

$$H = (\hat{U}_m^H (A - \tau I)^H \hat{U}_m)^{-1} (\hat{U}_m^H (A - \tau I)^H (A - \tau I) \hat{U}_m).$$

Sostituendo (14) nell'equazione sopra, da (10) otteniamo:

$$\begin{aligned}
H &= (D^H U_m^H (A - \tau I)^H U_m D)^{-1} (D^H U_m^H (A - \tau I)^H (A - \tau I) U_m D)^{-1} = \\
&= (D^H R_m^H Q_m^H U_m D)^{-1} (D^H R_m^H R_m U_m D) = \\
&= D^{-1} (Q_m^H U_m)^{-1} R_m D = \\
&= D^{-1} R_m^{-1} R_m (Q_m^H U_m)^{-1} R_m D = \\
&= (R_m D)^{-1} B (R_m D).
\end{aligned}$$

Dato che  $R_m$  e  $D$  sono matrici nonsingolari, dall'equivalenza sopra abbiamo che  $H$  e  $B$  sono simili e quindi hanno gli stessi autovalori, per cui esisterà una permutazione  $j_1, \dots, j_m$  tale che  $\tilde{\lambda}_i = \theta_{j_i}$ .  $\square$

Mostriamo ora una proposizione che mette in relazione i due residui  $\hat{r}_i$  e  $\tilde{r}_i$ , definiti come:

$$\hat{r}_i = ((A - \tau I)^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} I) \tilde{\phi}_i \quad (15)$$

e

$$\tilde{r}_i = (A - \tilde{\lambda}_i I) \tilde{\phi}_i \quad (16)$$

**Proposizione 2.4.2.** *Supponiamo che  $(\tilde{\lambda}_i, \tilde{\phi}_i)$  sia l'autocoppia in output dal metodo di tipo Arnoldi e i residui  $\tilde{r}_i, \hat{r}_i$  definiti come sopra. Allora vale*

$$\frac{|\tilde{\lambda}_i - \tau|}{\|(A - \tau I)^{-1}\|} \|\hat{r}_i\| \leq \|\tilde{r}_i\| \leq |\tilde{\lambda}_i - \tau| \|(A - \tau I)\| \|\hat{r}_i\| \quad (17)$$

*Dimostrazione.* Dalle relazioni (15) e (16) abbiamo:

$$\begin{aligned}
\|\tilde{r}_i\| &= \|(A - \tilde{\lambda}_i I) \tilde{\phi}_i\| = \\
&= \|(A - \tau I) \tilde{\phi}_i - (\tilde{\lambda}_i - \tau) \tilde{\phi}_i\| \\
&\leq |\tilde{\lambda}_i - \tau| \|(A - \tau I)\| \left\| \left( (A - \tau I)^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} I \right) \tilde{\phi}_i \right\| = \\
&= |\tilde{\lambda}_i - \tau| \|(A - \tau I)\| \|\hat{r}_i\|
\end{aligned}$$

e abbiamo anche inoltre:

$$\begin{aligned}
\|\hat{r}_i\| &= \left\| \left( (A - \tau I)^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} I \right) \tilde{\phi}_i \right\| \\
&= \left\| -((A - \tau I)^{-1}) (\tilde{\lambda}_i - \tau)^{-1} ((A - \tilde{\lambda}_i I) \tilde{\phi}_i) \right\| \\
&\leq \frac{1}{|\tilde{\lambda}_i - \tau|} \|(A - \tau I)^{-1}\| \|\tilde{r}_i\|.
\end{aligned}$$

Ragion per cui, supponendo che  $\tau$  non sia autovalore di  $A$ ,  $\|\hat{r}_i\| \rightarrow 0$  è equivalente a  $\|\tilde{r}_i\| \rightarrow 0$ .  $\square$

L'autovettore approssimato  $\tilde{\phi}_i$  usato nel metodo di tipo Arnoldi è in realtà un vettore di Ritz della matrice  $(A - \tau I)^{-1}$  rispetto al sottospazio di Krylov  $\mathcal{W}$ . Si verifica che un autovettore di Ritz, basandoci sulle analisi di convergenza del metodo di Rayleigh-Ritz, può non convergere in alcuni casi, specialmente se la matrice non è simmetrica. Per correggere la non convergenza, Jia [CG05] propone una classe di metodi di proiezione ortogonali "rifinita" per il problema agli autovalori standard. Il principio del metodo può essere applicato nel modo seguente: Per ogni autovalore approssimato  $\tilde{\lambda}_i$ , cerchiamo un autovettore  $u_i \in \mathcal{W}$  di lunghezza unitaria che soddisfi la seguente proprietà

$$\left\| \left( (A - \tau I)^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} I \right) u_i \right\| = \min \left\| \left( (A - \tau I)^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} I \right) u \right\| \quad (18)$$

con  $u \in \mathcal{Q}$ ,  $\|u\| = 1$ .

Consideriamo ora il vettore residuo relativo all'autocoppia  $(\tilde{\lambda}_i, u_i)$

$$r_i = (A - \tilde{\lambda}_i I) u_i \quad (19)$$

**Teorema 2.5.** *Assumiamo che  $z_i$  sia il vettore destro singolare associato al più piccolo valore singolare  $\sigma_{\min}(G_{m,i})$  della matrice  $G_{m,i}$ . Allora:*

$$u_i = Q_m z_i \quad (20)$$

$$\|r_i\| \leq |\tilde{\lambda}_i - \tau| \|A - \tau I\| \sigma_{\min}(G_{m,i}) \quad (21)$$

dove  $G_{m,i} = U_m R_m^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} Q_m$ .

*Dimostrazione.* Da (10) e (20) otteniamo

$$\begin{aligned} \left\| \left( (A - \tau I)^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} I \right) u_i \right\| &= \min_{z \in \mathbb{C}^m, \|z\|=1} \left\| \left( (A - \tau I)^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} I \right) Q_m z \right\| \\ &= \min_{z \in \mathbb{C}^m, \|z\|=1} \left\| \left( U_m R_m^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} Q_m \right) z \right\| \\ &= \sigma_{\min}(U_m R_m^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} Q_m) \\ &= \sigma_{\min}(G_{m,i}) \end{aligned}$$

da cui

$$\begin{aligned} \|r_i\| &= \|(A - \tilde{\lambda}_i I) u_i\| \\ &= \|(A - \tau I) - (\tilde{\lambda}_i - \tau) Q_m z_i\| \\ &= \left\| -(A - \tau I)(\tilde{\lambda}_i - \tau) \left( (A - \tau I)^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} I \right) Q_m z_i \right\| \\ &\leq |\tilde{\lambda}_i - \tau| \|(A - \tau I)\| \left\| \left( U_m R_m^{-1} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_i - \tau} Q_m \right) z_i \right\| \\ &= |\tilde{\lambda}_i - \tau| \|(A - \tau I)\| \sigma_{\min}(G_{m,i}) \end{aligned}$$

□

Basandoci sulle analisi di convergenza di [XW13], mostriamo quindi un teorema sulla convergenza del metodo "rifinito" di Arnoldi, che mostra un legame tra un'autocoppia computata dal metodo di tipo Arnoldi e l'espansione del sottospazio  $\mathcal{Q}$ , i.e. della quantità  $\sin \angle(\phi_i, \mathcal{Q})$

Definiamo prima le quantità:

$$\epsilon = \sin \angle(\phi_i, \mathcal{Q}), \quad \xi = \|(A - \tau I)\| \|(A - \tau I)^{-1}\|,$$

dove  $\sin \angle(\phi_i, \mathcal{Q}) = \|Q_{\perp} y\|$  rappresenta il seno dell'angolo formato da un autovettore  $\phi_i$  e il sottospazio approssimato  $\mathcal{Q}$ .

allora:

**Teorema 2.6.** *L'autocoppia approssimata  $(\lambda_i, u_i)$  soddisfa:*

$$\|(A - \lambda_i) u_i\| \leq \xi |\lambda_i - \tau| \frac{2\epsilon + (2 + \frac{\epsilon}{\sqrt{1-\epsilon^2}})^{1-\frac{1}{m}} (\frac{\epsilon}{\sqrt{1-\epsilon^2}})^{\frac{1}{m}}}{\sqrt{1-\epsilon^2}}. \quad (22)$$

Presentiamo quindi l'algoritmo finale del metodo di tipo Arnoldi "rifinito"

- Algoritmo 2.7.** 1. Dato il numero  $k$  di autocopie desiderate e una tolleranza  $tol$ , inizializzo un vettore di lunghezza unitaria  $q_0$
2. Genero una base ortonormale di  $\mathcal{Q}$ : Uso l'algoritmo 1 per generare  $Q_m, U_m$  ed  $R_m$
3. Sfrutto (13) per computare  $m$  autovalori di Ritz, ottengo quindi  $m$  autocopie  $(\tilde{\lambda}_i, \tilde{\phi}_i)$  e ne seleziono  $k$  tra queste
4. Computo ora per ogni  $\tilde{\lambda}_i$ , la matrice  $G_{m,i}$  corrispondente e computo di conseguenza l'autovettore  $u_i$  sfruttando (18)
5. Test di convergenza: Calcolo ora per ogni  $i = 1, \dots, k$  la norma dei residui  $\eta_i = \frac{\|r_i\|}{\|A\|_1}$ , se sono tutti minori o uguali di  $tol$  termino, altrimenti costruisco un nuovo vettore unitario  $q_0$  e torno allo step 2

### 3 Risultati numerici

Questi test numerici sono stati eseguiti su matrici sparse di dimensione  $n=2000$ . Suddividiamo i risultati numerici in due sezioni: la prima dedicata al metodo armonico di Rayleigh-Ritz, la seconda dedicata al metodo di tipo Arnoldi.

#### 3.1 Metodo armonico di Rayleigh-Ritz (HA/HAR)

Generiamo ora in matlab una matrice sparsa  $A$  di dimensione  $n = 2000$  con indice di sparsità  $n/6$ . Poniamo ora  $k = 4$ ,  $\tau = 6$  e al variare della dimensione  $m$  dello spazio di Krylov, confrontiamo in questa tabella l'accuratezza dei risultati ottenuti con quelli forniti dal comando "eigs" di matlab e il tempo  $t$  impiegato dall'algoritmo:

Harmonic Arnoldi Refined: Caso non simmetrico					
m	50	100	200	500	Eigs
t	1.062803e-01	1.382863e-01	5.021594e-01	3.248724e+00	1.419077e+00
$\tilde{\lambda}_1$	3.026871e+00	3.026871e+00	3.026871e+00	3.026871e+00	3.026871e+00
$\eta_1$	4.872438e-15	5.568591e-15	7.895553e-15	5.805653e-15	
$\tilde{\lambda}_2$	1.385928e+00	1.417236e+00	1.418240e+00	1.418347e+00	1.418347e+00
$\eta_2$	7.756590e-02	1.204951e-02	2.661791e-04	1.246625e-14	
$\tilde{\lambda}_3$	1.385928e+00	1.417236e+00	1.418240e+00	1.418347e+00	1.418347e+00
$\eta_3$	7.756590e-02	1.204951e-02	2.661791e-04	1.246625e-14	
$\tilde{\lambda}_4$	1.326318e+00	1.413974e+00	1.413809e+00	1.413734e+00	1.413734e+00
$\eta_4$	8.318612e-02	3.026152e-02	8.682839e-05	1.065497e-13	

Harmonic Arnoldi Refined: Caso simmetrico					
m	50	100	200	500	Eigs
t	1.283420e-01	2.265104e-01	7.192728e-01	4.271636e+00	9.433924e-01
$\tilde{\lambda}_1$	6.719760e+00	6.719760e+00	6.719760e+00	6.719760e+00	6.719760e+00
$\eta_1$	7.932474e-15	9.762955e-15	8.920034e-15	1.354375e-14	
$\tilde{\lambda}_2$	4.217538e+00	4.217663e+00	4.217663e+00	4.217663e+00	4.217663e+00
$\eta_2$	3.457090e-03	1.493337e-07	6.681732e-14	1.318575e-13	
$\tilde{\lambda}_3$	4.179670e+00	4.179788e+00	4.179788e+00	4.179788e+00	4.179788e+00
$\eta_3$	2.047026e-03	1.722168e-06	5.269894e-14	1.867491e-13	
$\tilde{\lambda}_4$	4.096966e+00	4.153827e+00	4.153828e+00	4.153828e+00	4.153828e+00
$\eta_4$	3.102208e-02	1.449691e-04	8.563515e-14	1.601997e-13	



### 3.2 Metodo di tipo Arnoldi (AT/RAT)

I risultati numerici ottenuti con questo algoritmo non coincidono con i risultati previsti: mostriamo qui un esempio con una matrice sparsa  $A$  simmetrica di dimensione  $n=2000$ .

Gli autovalori computati usando l'algoritmo 2.2 con valori in input ( $\tau = 6$ ,  $m = 100$ ,  $k = 4$ ) sono:  $\lambda_1 = 5.9999 + 0.0000i$ ,  $\lambda_2 = 5.6533 + 0.0000i$ ,  $\lambda_3 = 4.4501 + 0.0000i$ ,  $\lambda_4 = 4.3144 + 0.2747i$  con i rispettivi residui:  $\eta_1 = 0.5403$ ,  $\eta_2 = 0.3376$ ,  $\eta_3 = 0.2908$ ,  $\eta_4 = 0.2742$ .

Osserviamo che la matrice  $B$  computata come in (13), ha numero di condizionamento pari a  $1.4505e + 33$  ed è perciò mal condizionata.

Il rango della matrice  $U_m$  risulta però essere  $m - 1$ , ovvero il vettore  $q$  è contenuto in un sottospazio invariante di  $A$ .

Modifichiamo l'algoritmo 2.2 sfruttando il metodo di costruzione del vettore  $q_0$  suggerito da [Y.80]:

Il nuovo vettore iniziale viene cioè posto come

$$\alpha q_0 = \sum_{i=1}^k \|\eta_i\| (\Re(u_i) + \Im(u_i)) \quad (23)$$

dove  $\alpha$  è un fattore di normalizzazione. La ragione principale dietro questa scelta è la volontà di equilibrare la convergenza dei  $k$  autovettori. La formula (23) favorisce gli autovettori che convergono più lentamente.

Arnoldi Type: Caso simmetrico					
m	10	20	30	40	Eigs
t	3.142356e+01	6.075505e+01	9.563456e+01	1.200518e+02	9.433924e-01
$\tilde{\lambda}_1$	6.7876	6.7876	6.7876	6.7876	6.7876
$\eta_1$	6.3252e-05	8.8940e-09	3.8815e-06	0.0011	
$\tilde{\lambda}_2$	4.4487	4.4492	4.4492	4.4491	4.4492
$\eta_2$	0.0031	7.2450e-07	1.5667e-05	0.0024	
$\tilde{\lambda}_3$	3.8679	4.3536	4.3536	4.3535	4.3536
$\eta_3$	0.0055	2.2071e-06	8.9280e-05	0.0017	
$\tilde{\lambda}_4$	2.6218	4.1990	4.2881	4.2879	4.2881
$\eta_4$	0.0067	4.3463e-06	1.5984e-04	0.0018	

### 3.3 Metodo "rifinito" di tipo Arnoldi (AT/RAT)

Refined Arnoldi Type: Caso simmetrico					
m	10	20	30	40	Eigs
t	3.184578e+01	6.937211e+01	9.599239e+01	1.198812e+02	9.433924e-01
$\tilde{\lambda}_1$	6.7876	6.7876	6.7876	6.7827	6.7876
$\eta_1$	1.4238e-05	4.2382e-13	2.6002e-06	3.5024e-04	
$\tilde{\lambda}_2$	4.4491	4.4492	4.4492	4.4684	4.4492
$\eta_2$	0.0011	5.1470e-07	1.0384e-06	0.0014	
$\tilde{\lambda}_3$	3.9329	4.3536	4.3536	4.3702	4.3536
$\eta_3$	0.0021	1.3689e-06	5.4330e-07	0.0012	
$\tilde{\lambda}_4$	3.0509	4.1624	4.2881	4.2920	4.2881
$\eta_4$	0.0151	8.3844e-07	4.0761e-07	3.3931e-04	

## 4 Conclusioni

Notiamo quindi che il metodo di tipo Arnoldi (AT/RAT) converge, seppure con una minor precisione, anche per valori di  $m$  molto bassi, contrariamente al metodo armonico di Rayleigh-Ritz. Osserviamo anche che la scelta di rendere gli ultimi due algoritmi "iterativi" andando a modificare il vettore  $q_0$  iniziale ad ogni passo si traduce in una maggiore omogeneità di convergenza tra i  $k$  autovalori, diversamente ad esempio dal metodo armonico di Rayleigh Ritz in cui l'autovalore "estremale"

è nettamente più accurato. Inoltre, contrariamente ai risultati teorici, nei metodi di tipo Arnoldi l'accuratezza degli autovalori calcolati non aumenta di pari passo con la dimensione dello spazio di Krylov i. e. per  $\sin \angle(\phi_i, \mathcal{Q})$  che tende a zero.

## Riferimenti bibliografici

- [CG05] Jia Z. Chen G. A refined harmonic Rayleigh–Ritz procedure and an explicitly restarted refined harmonic Arnoldi algorithm. *Math. Comput. Model*, pages 615—627, 2005.
- [Saa11] Y. Saad. Numerical method for large eigenvalues problems. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 2011.
- [Ste01] G. W. Stewart. Matrix algorithms, vol. ii. eigensystems. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 2, 2001.
- [XW13] Lin-zhang Lu Xiang Wang, Qiang Niu. A refined Arnoldi type method for large scale eigenvalue problems. *The JJIAM Publishing Committee and Springer 2012*, pages 130–142, 2013.
- [Y.80] Saad Y. Variations on Arnoldi’s method for computing eigenelements of large unsymmetric matrices. *Linear Algebra Appl*, page 279, 1980.