O Algoritmo de Lanczos na variedade de Grassmann

A.P. Lopes*, A.J. Viamonte, A.J. Pascoal****

*** ISCAP – IPP – Porto***

***** Universidade Portucalense, Porto***

Coimbra, 25-28 Junho, 2008

Introdução

- **Desenvolvemos um novo algoritmo de Lanczos**

  → **Algoritmo de Grassmann - Lanczos**

- **A. Edelman, T. Arias and T. Smith**

  → ***The geometry of algorithms with orthogonality constraints***

Introdução

- **Cálculo de valores próprios, vectores próprios e subespaços invariantes**
- **Abordagem geométrica**
- **Estabelecer uma ponte entre a geometria e os algoritmos numéricos.**

Refinamento de estimativas de subespaços invariantes

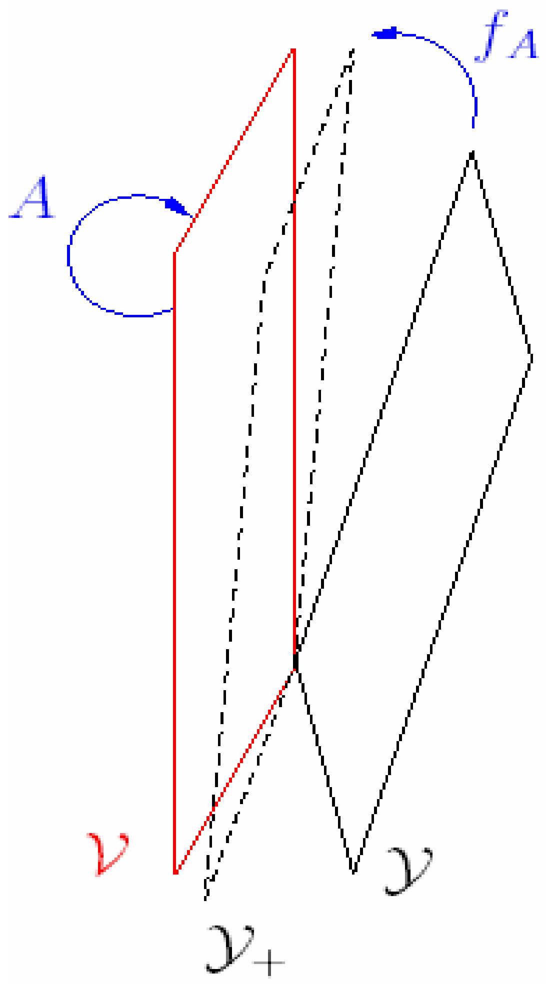
Dados:

- **Uma matriz A de ordem n**
- **Um subespaço $\mathcal{Y}$ = span(Y) p-dimensional, aprox. do subespaço invariante $\mathcal{V}$.**

Refinamento de estimativas de subespaços invariantes

Tarefa:

- **Calcular uma melhor estimativa de $\mathcal{V}$.**



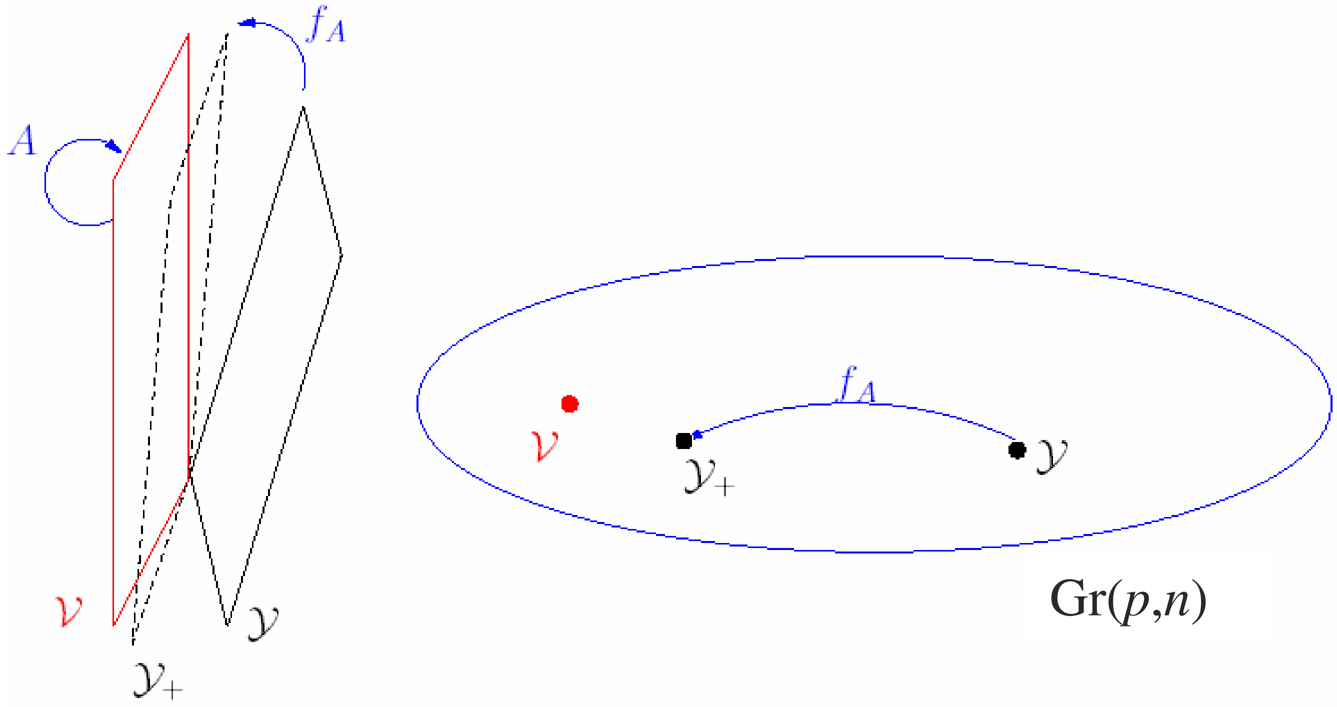
Refinamento de estimativas de subespaços invariantes

Definição:

- **Por vezes o termo subespaço próprio é usado como sinónimo de subespaço invariante, isto é,**

$$A\mathcal{V} \subseteq \mathcal{V}$$

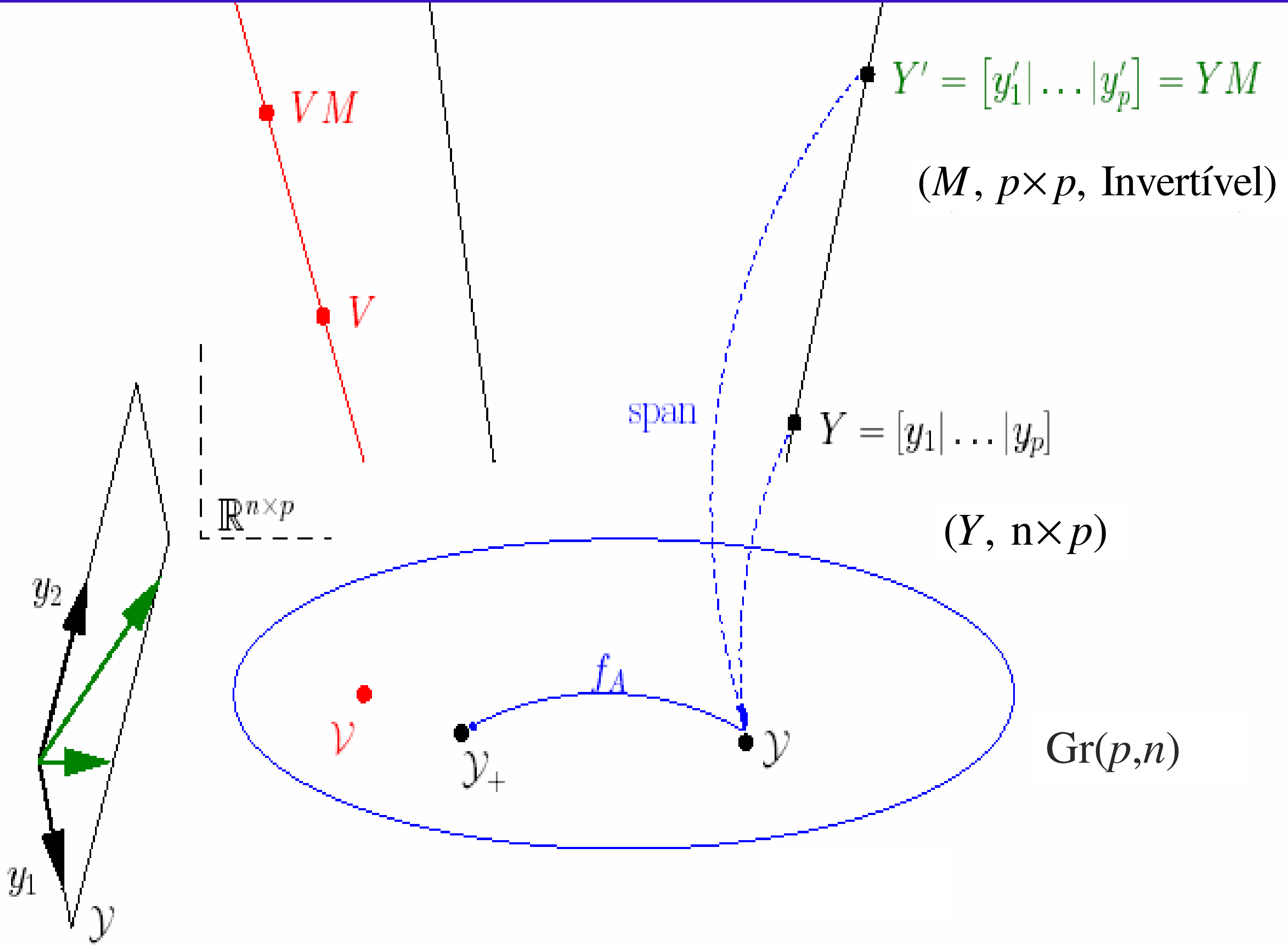
Refinamento de estimativas de subespaços invariantes



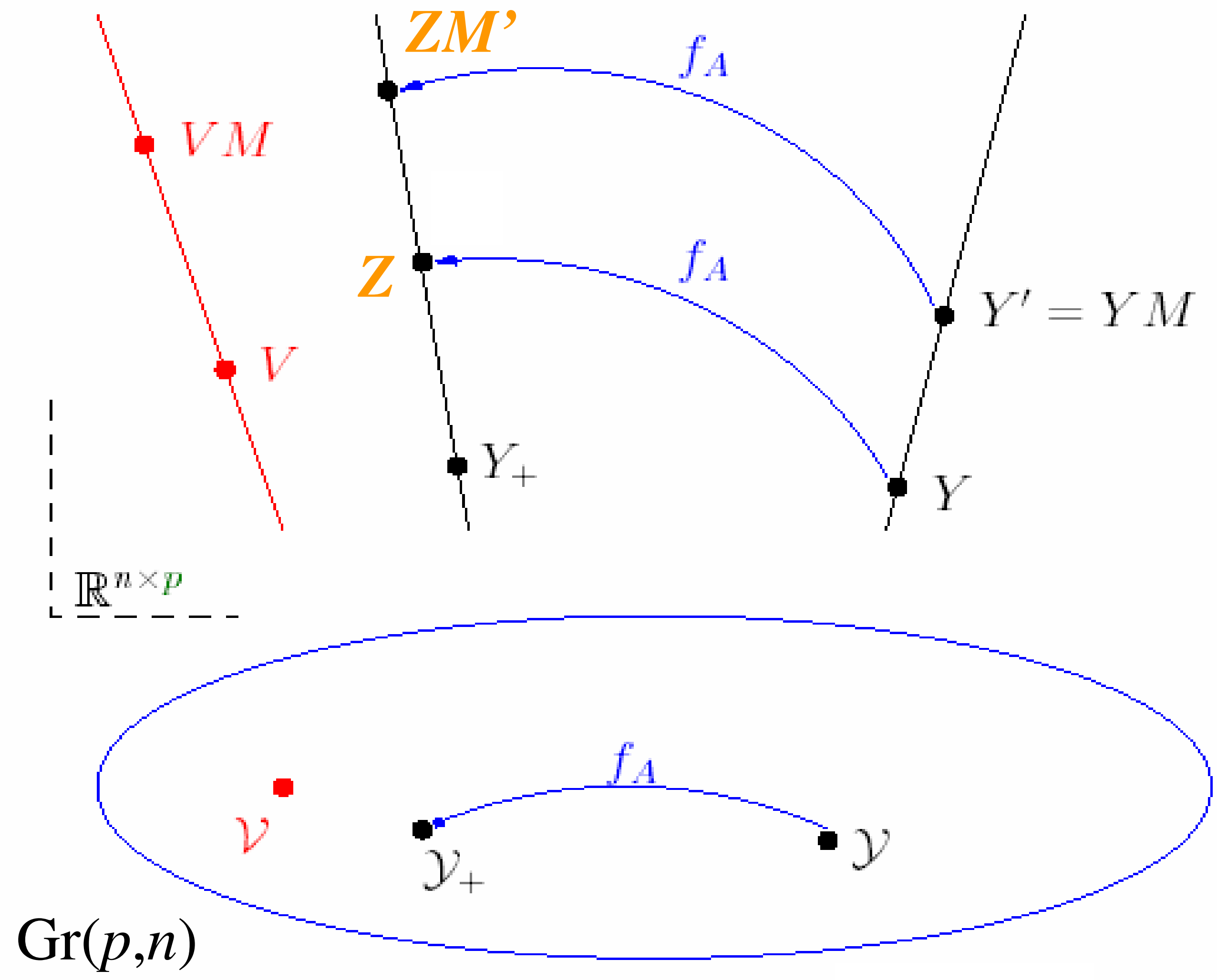
- $p = \dim(\mathcal{Y}) = \dim(\mathcal{Y}_+) = \dim(\mathcal{V})$

- Gr(p,n) – Variedade de Grassmann: conjunto de subespaços p-dimensionais de $\mathbb{R}^n$

Representação matricial



Iterações na variedade de Grassmann



Método de Lanczos

$$AQ = QT$$

$$T = Q^{-1} A Q$$

$$Q^{-1} = Q^{T}$$

$$T = Q^{T} A Q$$

Método de Lanczos

Três termos de recorrência

$$A\, q_j = \beta_{j-1} q_{j-1} + \alpha_j q_j + \beta_{j+1}\, q_{j+1}$$

Subespaço de Krylov

$$K_m(A, q_1) = \text{span}\ (\ q_1 \quad Aq_1\ \ldots\ A^{m-1} q_1\ )$$

Vectores de Lanczos

$$Q = [q_1, q_2, \ldots, q_n]$$

Método de Lanczos

Matriz tridiagonal simétrica

$$T_j = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{j-2} & \alpha_{j-1} & \beta_{j-1} \\ & & & \beta_{j-1} & \alpha_j \end{bmatrix}$$

Método de Lanczos na prática

- Perda de ortogonalidade (repetição de valores próprios)
- Algumas soluções propostas
  - Método de Lanczos com reortogonalização completa;
  - Método de Lanczos com semiortogonalização;
  - Método de Lanczos com recomeços implícitos;
  - Método de Lanczos Bloco;
  - Método de Lanczos Bloco com recomeços.

Método de Lanczos Bloco

Fórmula de recorrência

$$R_{i+1} = AQ_i - Q_i A_i - Q_{i-1} B_i^T \quad , \qquad i = 1, 2, \ldots, j$$

onde

$$A_i = Q_i^T A Q_i \qquad \text{e} \qquad R_{i+1} = Q_{i+1} B_{i+1}$$

Vectores de Lanczos Bloco

$$Q_J = \begin{bmatrix} Q_1 & Q_2 & \cdots & Q_j \end{bmatrix}$$

Método de Lanczos Bloco

Matriz tridiagonal bloco

$$T_j = \begin{bmatrix} A_1 & B_2^T & & & \\ B_2 & A_2 & B_3^T & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & B_j^T \\ & & & B_j & A_j \end{bmatrix}$$

Método de Lanczos Bloco

- **Dificuldades de armazenamento**
- **Perda de ortogonalidade**

Método de Lanczos Bloco com recomeços

- **Recomeça o Método de Lanczos Bloco com vectores iniciais com fortes componentes na direcção dos vectores próprios associados aos valores próprios desejados**

Algoritmo de Grassmann-Lanczos

- Uma aplicação induz uma iteração na variedade de Grassmann quando aplica fibras em fibras.

- O algoritmo de Lanczos não possui uma aplicação.

Algoritmo de Grassmann-Lanczos

- De um modo geral os algoritmos de Lanczos constróem subespaços de Krylov de dimensão cada vez mais elevada.

- Os subespaços obtidos após os recomeços no método de Lanczos Bloco com Recomeços constituem uma sequência de subespaços com a mesma dimensão.

Algoritmo de Grassmann-Lanczos (GL)

O algoritmo produz uma sequência de subespaços iterando a partir de $\mathcal{Y}_0$ sobre a aplicação

$$\begin{array}{ccc} \mathrm{Gr}(p,n) & \to & \mathrm{Gr}(p,n) \\ \mathcal{Y} & \mapsto & \mathcal{Y}_+ \end{array}$$

definida por:

1º Escolha uma matriz Y ortonormal, $n \times p$, isto é, tal que $\mathcal{Y} = \mathrm{span}(Y)$

2º Crie uma base ortonormal Q para o subespaço de Krylov

$$\mathcal{K}_m(Y) = span\left(Y, AY, \ldots, A^{m-1}Y\right)$$

3º Calcule a matriz quociente de Rayleigh $M = Q^T A Q$
que representa a projecção de A em $\mathcal{K}_m(Y)$

4º Calcule X, uma base ortonormal para o subespaço próprio p-dimensional dominante de M

5º Defina $\mathcal{Y}_+ = span\left(QX\right)$

Algoritmo de Grassmann-Lanczos

- **Define uma iteração na variedade de Grassmann**

- **Recomeça minimizando o quociente de Rayleigh** $\rho_A(Y) = \operatorname{tr} R_A(Y) = \operatorname{tr}\left(\left(Y^T Y\right)^{-1} Y^T A Y\right)$

- $S_m = \operatorname{span}\left(Y, AY, \ldots, A^{m-1}Y\right)$

Considerações finais

- Novo algoritmo de Lanczos na variedade de Grassmann

- Tanto quanto sabemos uma variante do método de Lanczos na variedade de Grassmann nunca tinha sido considerada.

Trabalho futuro

- Obter novos resultados de convergência

- Comparar Grassmann - Lanczos com outros métodos Grassmannianos.

O Algoritmo de Lanczos na variedade de Grassmann

A.P. Lopes*, A.J. Viamonte, A.J. Pascoal****

** ISCAP – IPP – Porto*

*** Universidade Portucalense, Porto*

Coimbra, 25-28 Junho, 2008