2020 年 2 月 计 算 数 学 第 42 卷第 1 期
Feb., 2020 MATHEMATICA NUMERICA SINICA Vol.42, No.1

计算矩阵函数双线性形式的 Krylov 子空间算法的误差分析*1)

贾仲孝 孙晓琳
(清华大学数学科学系, 北京 100084)

摘 要

矩阵函数的双线性形式 $u^T f(A)v$ 出现在很多应用问题中, 其中 $u, v \in \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $f(z)$ 为给定的解析函数. 开发其有效可靠的数值算法一直是近年来学术界所关注的问题, 其中关于其数值算法的停机准则多种多样, 但欠缺理论支持, 可靠性存疑. 本文将对矩阵函数的双线性形式 $u^T f(A)v$ 的数值算法和后验误差估计进行研究, 给出其基于 Krylov 子空间算法的误差分析, 导出相应的误差展开式, 证明误差展开式的首项是一个可靠的后验误差估计, 据此可以为算法设计出可靠的停机准则.

关键词: 双线性形式; Krylov 子空间方法; 相对误差估计; 停机准则

MR (2010) 主题分类: 65F30, 65F10

1. 引 言

本文研究矩阵函数双线性形式的数值计算方法及其后验误差估计, 具体的数学表达式如下：

$$u^T f(A)v, \tag{1.1}$$

矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是大规模稀疏矩阵, u, v 满足 $\|u\| = 1$, $\|v\| = 1$, 这里 $\|\cdot\|$ 是 2 范数, 上标 T 表示向量或矩阵的转置, $f(z)$ 是在给定区域上的解析函数, 且使得矩阵函数 $f(A)$ 有定义. 我们主要对实矩阵进行研究, 复矩阵除了计算复杂性较实矩阵高之外, 理论上没有本质区别.

矩阵函数双线性形式 $u^T f(A)v$ 的应用十分广泛, 如积分方程的数值求解、模型降阶 [14]、共轭梯度法的计算精度估计 [10] 等等. 关于其算法的分析与设计, Gene Golub [8–10] 是其关键人物. 他将双线性形式 (1.1) 化成一种 Riemann-Stieltjes 积分 [5–7, 9] 的形式, 而后采用求积公式得到了数值计算矩阵函数双线性形式的一个近似值, 这也是近年来求解矩阵函数二次型问题最常采用的方法 [11]. 但是关于该方法尚无一个可设计为停机准则的后验误差估计 [12, 13]. 但是我们发现其积分近似值本质上与采用 Krylov 子空间方法计算 $u^T f(A)v$ 得到的结果一致, 而针对给定区域内的解析函数, 关于计算矩阵函数乘向量 $f(A)v$ 的 Krylov 子空间方法 [2] 已有完备的后验误差估计理论. 因此, 从 Krylov 子空间的角度出发, 我们可以将数值计算 $f(A)v$ 的 Krylov 子空间方法的后验误差估计理论推广到矩阵函数双线性形式 $u^T f(A)v$ 上, 从而可以建立可靠的后验误差估计, 以作为停机准则.

本文首先给出计算 $u^T f(A)v$ 的 Krylov 子空间方法, 并给出其误差估计的分析. 当矩阵函数在给定区域内解析并满足一定条件时, 给出关于其误差的误差展开式, 理论上证明误差展开

* 2018 年 10 月 5 日收到.
1) 基金项目: 国家自然科学基金资助 (项目编号 11771249).

式的首项是一个可靠后验误差估计, 最后报告数值实验, 针对一些常用的函数, 如指数函数、三角函数, 验证误差估计的可靠性. 对一些非解析函数, 如双曲函数, 虽然不能理论上证明误差展开式首项是一个可靠的后验误差估计, 但数值实验表明, 所导出的误差估计仍然是真实误差的可靠估计.

文中 $\mathbb{C}^{n\times n}$ 或 $\mathbb{R}^{n\times n}$ 表示 n 阶复矩阵或实矩阵集合, $\mathbb{C}^n$ 或 $\mathbb{R}^n$ 表示 n 维复列向量或实向量集合, A^H 或 A^T 表示矩阵 A 的共轭转置或转置. $||\cdot||$ 表示向量或矩阵的 2- 范数, $||\cdot||_F$ 表示矩阵的 F- 范数. $spec(A)$ 表示矩阵 A 的谱, $\mathcal{F}(A)$ 表示矩阵 A 的数值域, 即 $\mathcal{F}(A)=\{x^HAx: x\in\mathbb{C}^N, x^Hx=1\}$. $\lambda_{\max}(A)$ 和 $\lambda_{\min}(A)$ 表示实对称矩阵 A 的最大和最小特征值, I 表示相应阶数的单位矩阵, e_j 表示单位矩阵的第 j 列.

2. 计算 $u^Tf(A)v$ 的 Krylov 子空间方法

矩阵函数的双线性形式 $u^Tf(A)v$ 涉及到矩阵函数 $f(A)$ 和矩阵函数乘向量 $f(A)v$, 计算矩阵函数的标准算法均没有考虑到矩阵 A 可能有的特殊结构, 在计算过程中可能破坏其特殊结构, 因此在针对具有特殊结构的大规模矩阵会导致计算量和存储量过大, 不能接受. 所以问题的关键还是计算矩阵函数乘向量 $f(A)v$, 对于大规模矩阵, 最经典方法的是基于 Krylov 子空间的方法. 在此基础上, 想要得到矩阵函数的双线性形式只需要再进行一步向量内积即可. 计算矩阵函数乘向量的 Krylov 子空间算法本质上属于投影类算法, 投影类算法在求解大规模线性代数问题时十分有效, 因此科研工作者在研究矩阵函数乘向量的有效数值算法中开发出了相应的投影类算法, 其投影空间是 Krylov 子空间. 该方法可以充分利用矩阵 A 的稀疏性, 因为在形成子空间的一组基底时只利用到了矩阵向量乘的操作. Krylov 子空间算法将原大规模问题 $f(A)v$ 投影到了一个低维的子空间, 然后通过标准算法来求解相应的中小规模的问题即可得到其近似.

这里我们采取 Arnoldi 方法来近似 $u^Tf(A)v$, 其 Arnoldi 近似基于如下的 Arnoldi 分解：

$$AV_k = V_kH_k + h_{k+1,k}v_{k+1}e_k^T, \tag{2.1}$$

其中 $V_k=[v_1,v_2,\cdots,v_k]$ 的列构成了 Krylov 子空间 $\mathcal{K}_k(A,v_1)=\mathrm{span}\{v_1,Av_1,\cdots,A^{k-1}v_1\}$ 的一组标准正交基, $H_k=[h_{i,j}]$ 为 k 阶上 Hessenberg 矩阵, $e_k\in\mathbb{R}^k$ 为 k 阶单位阵的第 k 列.

由 (2.1) 可得 $H_k=V_k^TAV_k$, 因此有

$$u^Tf(A)v \approx \beta u^TV_kV_k^Tf(A)V_ke_1 \approx \beta u^TV_kf(V_k^TAV_k)e_1 = \beta u^TV_kf(H_k)e_1 \equiv F_k, \tag{2.2}$$

F_k 即为 $u^Tf(A)v$ 的 Arnoldi 近似, 上述方法称为标准 Arnoldi 方法, 其中 $\beta=\|v\|$, Arnoldi 分解中的初始向量 $v_1=v/\beta$.

3. $E_k(f)$ 的误差展开式

令

$$F_k = \beta u^TV_kf(H_k)e_1 \tag{3.1}$$

为 $u^Tf(A)v$ 的 Arnoldi 近似. 定义误差

$$E_k(f) = u^Tf(A)v - F_k = u^Tf(A)v - \beta u^TV_kf(H_k)e_1. \tag{3.2}$$