Available online at www.sciencedirect.com
SCIENCE DIRECT®
ELSEVIER
C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 340 (2005) 855–860
COMPTES RENDUS MATHEMATIQUE
http://france.elsevier.com/direct/CRASS1/

Analyse numérique/Analyse fonctionnelle

Image numérique, GMRES et polynômes de Faber

Bernhard Beckermann [1]

Laboratoire Paul-Painlevé, UMR 8524 (ANO-EDP), UFR mathématiques – M3, UST Lille, 59655 Villeneuve d'Ascq cedex, France

Reçu le 11 avril 2005 ; accepté le 25 avril 2005

Disponible sur Internet le 17 mai 2005

Présenté par Philippe G. Ciarlet

Résumé

Soit F_n le polynôme de Faber de degré n associé à l'image numérique d'un opérateur linéaire continu A sur un espace de Hilbert. Nous montrons dans un premier temps que $\|F_n(A)\| \leqslant 2$. Nous en déduisons ensuite, en terme d'image numérique, de nouvelles estimations d'erreur pour la méthode GMRES, méthode itérative adaptée à la résolution des systèmes linéaires non-hermitiens. ***Pour citer cet article : B. Beckermann, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 340 (2005).***

Abstract

Numerical range, GMRES and Faber polynomials. We first show that $\|F_n(A)\| \leqslant 2$, where A is a linear continuous operator acting in a Hilbert space, and F_n is the Faber polynomial of degree n corresponding to the numerical range of A. Then we deduce several new error bounds based on the numerical range for GMRES, an iterative method for solving non-Hermitian systems of linear equations. ***To cite this article: B. Beckermann, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 340 (2005).***

Abridged English version

The numerical range (or field of values) $W(A)$ of a linear continuous operator A in a Hilbert space $\mathcal{H}$ is defined by (1). Given a convex compact $E \subset \mathbb{C}$, we define as usual the nth Faber polynomial $F_n = F_n^E$ to be the polynomial part of the Laurent expansion at infinity of ϕ^n, where the Riemann map ϕ maps conformally the exterior of E onto the exterior of the closed unit disk $\mathbb{D}$, and $\phi(\infty) = \infty$, $\phi'(\infty) > 0$.

In the first part of this Note we show in Theorem 1.1 that, for any convex and compact $E \subset \mathbb{C}$, for any A with $W(A) \subset E$ and for any $n \geqslant 1$ there holds $\|F_n^E(A)\| \leqslant 2$, the constant 2 being optimal. Our proof of Theorem 1.1 is

Adresse e-mail : bbecker@math.univ-lille1.fr (B. Beckermann).

[1] Supported in part by INTAS network NeCCA 03-51-6637, and in part by the Ministry of Science and Technology (MCYT) of Spain and the European Regional Development Fund (ERDF) through the grant BFM2001-3878-C02-02.

1631-073X/$ – see front matter
doi:10.1016/j.crma.2005.04.027

strongly inspired by some recent deep work of Crouzeix and his collaborators [7,2,4–6] on the norm of functions of operators $p(A)$, and uses, in particular, the Carl Neumann double layer potential representation of $p(A)$ introduced by Badea, Crouzeix and Delyon in [2, Section 4]. Theorem 1.1 has been known before for the case of an ellipse E, including the limiting cases of a disk and an interval [9,13]. It is quite instructive to compare Theorem 1.1 to a result of Atzmon, Eremenko and Sodin [1] who show that $\limsup \|F_n^E(A)\|^{1/n} \leqslant 1$ if and only if $\sigma(A) \subset E$, and to a result of Toh and Trefethen [17, Theorem 1.1] who give bounds of the form $\|F_n^E(A)\| \leqslant 2e(n+1)\mathcal{K}$ with a constant $\mathcal{K}$ of Kreiss type depending on E, and in particular $\mathcal{K} = 1$ if $W(A) \subset E$. Also, in [17, Theorem 1.2] the authors give bounds for $\|F_n^E(A)\|$ which are independent of n but increasing linearly with the dimension of the Hilbert space $\mathcal{H}$ (supposed to be finite dimensional).

In the second part we apply Theorem 1.1 to the error analysis for the GMRES method [16], a popular iterative method for solving non-Hermitian systems of equations $Ax = b$. For the kth residual $r_k = b - Ax_k$ of GMRES, we establish in Theorem 1.2 estimates of the form

$$\|r_k\| \leqslant c\|r_0\|\gamma^k,$$

with an explicit constant $c \leqslant 3$, and an explicitly given asymptotic convergence factor $\gamma < 1$ depending only on the numerical range of A and its distance to the origin. GMRES error estimates in terms of the numerical range of the above type have been suggested first probably by Eiermann [9] and promoted in the book of Greenbaum (see [13, Sections 2 and 3], where one also finds a nice comparison with other types of error estimates for Krylov subspace methods). To our knowledge, an explicit value for the constant c for arbitrary A has been only given recently in [3, Corollary 2.4], where it is shown that $c \leqslant 101.25$. This value is a consequence of a recent result of Crouzeix [4] saying that there is a universal constant $2 \leqslant C \leqslant 33.75$ such that for each polynomial and for each linear bounded operator A we have the bound (2). Both upper bounds for c and C have been considered as quite pessimistic, indeed the conjecture of Crouzeix says that C in (2) can be replaced by 2. Our proof of Theorem 1.2 via Theorem 1.1 is selfcontained and does not require the knowledge of the optimal constant in (2).

We finally give in Corollary 1.3 an estimate for GMRES which requires only the knowledge of the numerical radius of A and the distance of $W(A)$ to the origin. Estimates of this type have been given by Elman [12] (see also [11]), and recently in [3, Theorem 2.1], where a smaller asymptotic convergence factor was found. This latter result will be slightly improved in Corollary 1.3.

1. Introduction et résultats

Soit A un opérateur linéaire continu sur un espace de Hilbert complexe $\mathcal{H}$, muni de la norme $\|\cdot\|$ induite par le produit scalaire de $\mathcal{H}$. L'image numérique de A, définie par

$$W(A) = \{(Ay, y):\ y \in \mathcal{H}, \|y\| = 1\}, \tag{1}$$

est convexe par le théorème de Toeplitz et Hausdorff, et contient le spectre $\sigma(A)$. Si A est normal, nous avons l'inégalité $\|p(A)\| \leqslant \|p\|_{L_\infty(\overline{W(A)})}$ pour tout polynôme p. Récemment, Crouzeix [4] a montré qu'il existe une constante universelle $2 \leqslant C \leqslant 33,75$ telle que, pour tout polynôme p et pour tout opérateur linéaire borné A,

$$\|p(A)\| \leqslant C\|p\|_{L_\infty(\overline{W(A)})}. \tag{2}$$

Il a aussi émis la conjecture que la constante optimale dans (2) est $C = 2$. On trouvera dans [7,2,4–6] des majorations plus précises pour des sous-classes d'opérateurs à image numérique contenue dans un fermé E donné, ainsi que des applications diverses (probabilités, edp, algèbre linéaire numérique, ...).

Le but de cette Note est d'expliciter une inégalité analogue à (2) pour certains polynômes particuliers, dits de Faber, au Théorème 1.1 ci-dessous, et d'exploiter ce résultat pour en déduire au Théorème 1.2 une nouvelle estimation d'erreur pour la méthode GMRES [16], méthode itérative très populaire pour la résolution des systèmes d'équations linéaires $Ax = b$, où A est une matrice carrée pas forcement normale, souvent creuse et de très grande taille. Etant donné un convexe compact $E \subset \mathbb{C}$, on considère l'application conforme de Riemann $\phi = \phi_E$ qui envoie le complémentaire de E sur le complémentaire du disque unité fermé $\mathbb{D}$, et qui vérifie $\phi(\infty) = \infty$ et $\phi'(\infty) > 0$. Le $n$ième polynôme de Faber $F_n = F_n^E$ associé à E est donné par la partie polynômiale de la série de Laurent de ϕ^n au voisinage de l'infini.

Pour un opérateur A linéaire continu, Atzmon, Eremenko et Sodin [1] ont montré que

$$\limsup_{n\to\infty} \left\| F_n^E(A) \right\|^{1/n} \leqslant 1 \quad \Longleftrightarrow \quad \sigma(A) \subset E. \tag{3}$$

Pour un disque $E = r\mathbb{D}$ nous avons $F_n^E(z) = (z/r)^n$, et donc (3) est une généralisation naturelle de la formule de Gelfand sur le rayon spectral. Toh et Trefethen [17, Theorem 1.1] ont donné la borne $\|F_n^E(A)\| \leqslant 2e(n+1)\mathcal{K}$ avec une constante $\mathcal{K}$ de type Kreiss qui dépend de E, en particulier $\mathcal{K} = 1$ si $W(A) \subset E$. Les auteurs donnent dans [17, Theorem 1.2] une autre borne pour $\|F_n^E(A)\|$ qui est indépendante de n mais qui croît linéairement avec la dimension de l'espace $\mathcal{H}$. Dans le cas $W(A) \subset E$, nous pouvons être plus précis.

Théorème 1.1. *Soit E un convexe compact et $W(A) \subset E$, alors, pour tout $n \geqslant 1$,*

$$\left\| F_n^E(A) \right\| \leqslant 2. \tag{4}$$

La preuve de ce théorème, donnée en Section 3, est basée sur des techniques de Badea, Crouzeix et Delyon exposées dans [2, Section 4]. Notons que le Théorème 1.1 est connu dans le cas d'un intervalle. Par exemple, si $E = [-1, 1]$ alors A est forcement auto-adjoint, et $F_n^E = 2T_n$, avec T_n le $n$ième polynôme de Chebyshev qui est borné par 1 sur E : par conséquent, (4) découle de la théorie spectrale. Plus généralement, le Théorème 1.1 a été montré (implicitement) pour une ellipse E par Eiermann [9]. Notons l'exemple

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \|A\| = 1, \qquad W(A) = E = \left\{ |z| \leqslant \frac{1}{2} \right\}$$

avec $F_1^E(z) = 2z$ qui montre que la quantité 2 dans (4) ne peut pas être remplacée par une constante plus petite. Pour comparer (4) avec (2), notons également que $\|F_n^E\|_{L_\infty(E)} \leqslant 2$ par convexité de E, voir Kővari et Pommerenke [14, Theorem 2].

Notre Théorème 1.1 admet plusieurs applications dans l'estimation d'erreur des méthodes de Krylov en algèbre linéaire numérique. Nous allons discuter en détail de la méthode GMRES pour la résolution des systèmes d'équations linéaires $Ax = b$, où A est une matrice carrée pas forcément normale. La méthode GMRES peut être caractérisée par le fait que le résidu du $k$ième itéré, $r_k = b - Ax_k \in \operatorname{span}\{r_0, A_0, \ldots, A^{k-1}r_0\}$, vérifie la propriété

$$\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|} = \min\left\{ \frac{\|p(A)r_0\|}{|p(0)|\|r_0\|} \colon\ p \text{ polynôme de degré au plus } k \right\}, \tag{5}$$

et donc $\|r_k\|$ est décroissant en k. Partant de l'expression obtenue en majorant $\|p(A)r_0\|$ dans (5) par $\|p(A)\|\|r_0\|$, une expression qui est indépendante du résidu initial r_0 et du second membre b, il existe un nombre important d'estimations pour la convergence de GMRES, voir [15, Chapter 6.11] ou [13, Chapter 3]. Ces bornes sont formulées en terme du conditionnement (potentiellement élevé) de la matrice des vecteurs propres [15], du pseudo-spectre de A, des angles entre sous-espaces de Krylov [10] ou de l'image numérique de A [9,13], voir aussi [3, Corollary 2.4] pour une version plus explicite basée sur (2). Nous proposons ici le résultat suivant :

Théorème 1.2. *Soit E un convexe compact tel que $0 \notin E$ et $W(A) \subset E$. Nous avons alors, pour le $k$ième résidu relatif de GMRES, les estimations suivantes*

$$\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|} \leqslant \frac{2}{1 - \gamma_E^{k+1}} \gamma_E^k, \qquad \frac{\|r_k\|}{\|r_0\|} \leqslant (2 + \gamma_E)\gamma_E^k, \tag{6}$$

où $\gamma_E := 1/|\phi_E(0)| < 1$.

L'estimation d'erreur du Théorème 1.2 est typiquement intéressante pour un nombre d'itérations k pas trop élevé car elle ne permet pas de décrire un comportement super-linéaire de la convergence. Pour une matrice symétrique définie positive A, le choix $E = [\lambda_{\min}(A), \lambda_{\max}(A)]$ au Théorème 1.2 donne lieu à $\gamma_E = (\sqrt{\kappa} - 1)/(\sqrt{\kappa} + 1)$, avec $\kappa = \lambda_{\max}(A)/\lambda_{\max}(A)$ le conditionnement de A ; on obtient ainsi le même taux de convergence que dans l'estimation classique du gradient conjugué (qui est aussi valable pour le résidu relatif dans GMRES). Le cas particulier d'un disque E est discuté dans [13, Section 3] ; pour une ellipse E, une combinaison de [13, Section 3] et [9] donne un résultat similaire au Théorème 1.2.

Pour une matrice particulière A avec $0 \notin W(A)$, on peut expliciter numériquement la constante γ_E par exemple en déterminant un polygone convexe E contenant $W(A)$ (il suffit de calculer les valeurs propres extrêmes de $\mathrm{Re}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}t} A)$ pour certaines valeurs réelles de t), et en utilisant la boîte à outils Schwartz–Christoffel [8] pour le calcul approché de $\phi_E(0)$.

Nous proposons finalement comme conséquence du Théorème 1.2 une borne qui est plus facilement utilisable car elle ne requiert que très peu d'informations sur la matrice A.

Corollaire 1.3. *Soit* $0 \notin W(A)$. *Nous avons l'estimation suivante pour le kième résidu relatif de GMRES*

$$\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|} \leqslant (2+\gamma)\,\gamma^k, \quad \gamma := 2\sin\left(\frac{\beta}{4-2\beta/\pi}\right) < \sin(\beta), \tag{7}$$

où l'angle $\beta \in (0, \pi/2)$ *est défini par* $\cos(\beta) = \mathrm{dist}(0, W(A))/\nu(A)$ *et* $\nu(A)$ *désigne le rayon numérique* $\nu(A) = \max\{|z|\colon\ z \in W(A)\}$.

L'inégalité (7) avec un facteur supplémentaire $2 + 3/\sqrt{2}$ et un angle généralement plus grand défini par $\cos(\beta') = \mathrm{dist}(0, W(A))/\|A\|$ a été démontrée récemment dans [3, Theorem 1]. Elle généralise l'inégalité d'Elman [11,12] qui dit que $\|r_k\| \leqslant \sin^k(\beta')\,\|r_0\|$.

2. Démonstrations

Démonstration du Théorème 1.1. Comme $\phi^n - F_n$ et ϕ^{-n} sont analytiques dans $\overline{\mathbb{C}} \setminus E$ et s'annulent en ∞ pour $n \geqslant 1$, nous avons d'après la formule de Cauchy pour tout $|r| > 1$ et $\zeta \in E$ ou $\zeta \notin E$ avec $|\phi(\zeta)| < r$,

$$\frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int\limits_{|\phi(z)|=r} \frac{\phi(z)^n}{z-\zeta}\,\mathrm{d}z = \begin{cases} F_n(\zeta) & \text{si } n \geqslant 0, \\ 0 & \text{si } n < 0. \end{cases}$$

Sachant que $\sigma(A) \subset \overline{W(A)} \subset E$, nous déduisons en utilisant la représentation intégrale de Dunford–Taylor que

$$\frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int\limits_{|\phi(z)|=r} \phi(z)^n (zI - A)^{-1}\,\mathrm{d}z = \begin{cases} F_n(A) & \text{si } n \geqslant 0, \\ 0 & \text{si } n < 0, \end{cases} \tag{8}$$

où nous remarquons qu'on peut faire tendre r vers 1, ce qui donne pour $n \geqslant 1$

$$0 = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int\limits_{\partial E} \phi(z)^{-n}\,(zI - A)^{-1}\,\mathrm{d}z = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \int\limits_{\partial E} \overline{\phi(z)}^n (zI - A)^{-1}\,\mathrm{d}z. \tag{9}$$

L'ensemble E étant convexe, le vecteur unitaire $\nu(z)$ normal extérieur au point $z \in \partial E$ existe presque partout et on a $\mathrm{i}\nu(z) = \mathrm{d}z/|\mathrm{d}z|$. En combinant (8) avec l'adjoint de (9), nous obtenons pour $n \geqslant 1$

$$F_n(A) = \int\limits_{\partial E} \phi(z)^n \mu(z, A)|\mathrm{d}z|, \quad \mu(z, A) := \frac{1}{2\pi}\big(\nu(z)(zI - A)^{-1} + \bar{\nu}(z)(\bar{z}I - A^*)^{-1}\big), \tag{10}$$

c'est-à-dire, nous obtenons pour $F_n(A)$ la représentation de Carl Neumann introduite dans [2, Section 4.1], avec une fonction ϕ^n facile à estimer. Pour conclure, nous suivons l'approche de [7,2,4–6] : comme $\nu(z)$ est la normale extérieure de E en $z \in \partial E$ et $W(A) \subset E$, nous observons que $\mu(z, A)$ est auto-adjointe et semi-definie positive en presque tout $z \in \partial E$, et $\int_{\partial E} \mu(z, A)|\mathrm{d}z| = 2I$ par (8). En conséquence,

$$\|F_n(A)\| \leqslant \max_{\zeta \in \partial E} |\phi(\zeta)^n| \sup_{y \in \mathcal{H}, \|y\|=1} \int_{\partial E} \big(\mu(z, A)y, y\big)|\mathrm{d}z| = 2. \qquad \square$$

Démonstration du Théorème 1.2. Montrons dans un premier temps la chaîne d'inégalités

$$\min\left\{\frac{\|p(A)\|}{|p(0)|}\colon\ p \text{ polynôme de degré au plus } k\right\} \leqslant \frac{2}{|F_k^E(0)|} \leqslant \frac{2\gamma_E^k}{1-\gamma_E^{k+1}}. \tag{11}$$

La première inégalité dans (11) est une conséquence simple du Théorème 1.1. Pour estimer inférieurement $|F_k(0)|$ pour le polynôme de Faber $F_k = F_k^E$, nous allons procéder comme par exemple dans [3, Lemma 2.2] : d'après l'hypothèse $0 \notin E$ et le principe du maximum appliqué à la fonction $\phi_E(\phi_E^k - F_k)$ analytique dans $\overline{\mathbb{C}} \setminus E$,

$$\begin{aligned}
|\phi_E(0)||F_k(0)| &\geqslant |\phi_E(0)|^{k+1} - \big|\phi_E(0)\big(\phi_E(0)^k - F_k(0)\big)\big| \\
&\geqslant |\phi_E(0)|^{k+1} - \max_{z \in \partial E} \big|\phi_E(z)\big(\phi_E^k(z) - F_k(z)\big)\big| \\
&= |\phi_E(0)|^{k+1} - \max_{z \in \partial E} \big|\phi_E^k(z) - F_k(z)\big| \geqslant |\phi_E(0)|^{k+1} - 1,
\end{aligned}$$

la dernière estimation utilisant la convexité de E ayant été montrée par Kővari et Pommerenke [14, Theorem 2]. Ceci démontre (11). Finalement, une combinaison de (5) et (11) donne la première estimation du Théorème 1.2, et la deuxième découle du fait que $\min\{1, 2\gamma_E^k/(1-\gamma_E^{k+1})\} \leqslant (2+\gamma_E)\gamma_E^k$. $\square$

Démonstration du Corollaire 1.3. En multipliant si nécessaire A par un facteur $\mathrm{e}^{\mathrm{i}t}$ de module 1, nous pouvons supposer que $d = \mathrm{dist}(0, W(A))$ coïncide avec la plus petite valeur propre de $(A + A^*)/2$. Il suffit alors d'appliquer le Théorème 1.2 avec la lentille

$$E = \big\{z \in \mathbb{C}\colon\ \mathrm{Re}(z) \geqslant d,\ |z| \leqslant \nu(A)\big\}$$

qui contient clairement $W(A)$. Le calcul de ϕ_E est élémentaire, les formules correspondantes sont données dans [3, preuve du Lemme 2.2]. $\square$

Remerciements

L'auteur remercie Michel Crouzeix et Catalin Badea pour leurs remarques constructives et pour les références [1,17].

Références

[1] A. Atzmon, A. Eremenko, M. Sodin, Spectral inclusions and analytic continuation, Bull. London Math. Soc. 31 (1999) 722–728.
[2] C. Badea, M. Crouzeix, B. Delyon, Convex domains and K-spectral sets, à paraître dans Math. Z. (2005).
[3] B. Beckermann, S.A. Goreinov, E.E. Tyrtyshnikov, Some remarks on the Elman estimate for GMRES, Manuscript, 2004.
[4] M. Crouzeix, Numerical range, holomorphic calculus and applications, Manuscript, 2005.
[5] M. Crouzeix, Operators with numerical range in a parabola, Arch. Math. 82 (2004) 517–527.
[6] M. Crouzeix, B. Delyon, Some estimates for analytic functions of strip or sectorial operators, Arch. Math. 81 (2003) 553–566.

[7] B. Delyon, F. Delyon, Generalization of Von Neumann's spectral sets and integral representation of operators, Bull. Soc. Math. France 1 (1999) 25–42.
[8] T. Driscoll, A MATLAB toolbox for Schwartz–Christoffel mapping, ACM Trans. Math. Software 8 (1996) 168–186.
[9] M. Eiermann, Fields of values and iterative methods, Linear Algebra Appl. 180 (1993) 167–197.
[10] M. Eiermann, O.G. Ernst, Geometric aspects in the theory of Krylov subspace methods, Acta Numerica 10 (2001) 251–312.
[11] S.C. Eisenstat, H.C. Elman, M.H. Schultz, Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations, SIAM J. Numer. Anal. 20 (1983) 345–357.
[12] H.C. Elman, Iterative methods for sparse nonsymmetric systems of linear equations, PhD Thesis, Department of Computer Science, Yale University, 1982.
[13] A. Greenbaum, Iterative Methods for Solving Linear Systems, Frontiers Appl. Math., vol. 17, SIAM, 1997.
[14] T. Kövari, Ch. Pommerenke, On Faber polynomials and Faber expansions, Math. Z. 99 (1967) 193–206.
[15] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, PWS Publishing, Boston, MA, 1996.
[16] Y. Saad, M.H. Schultz, GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Comput. 7 (1986) 856–869.
[17] K.C. Toh, L.N. Trefethen, The Kreiss matrix theorem on a general complex domain, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 21 (1999) 145–165.