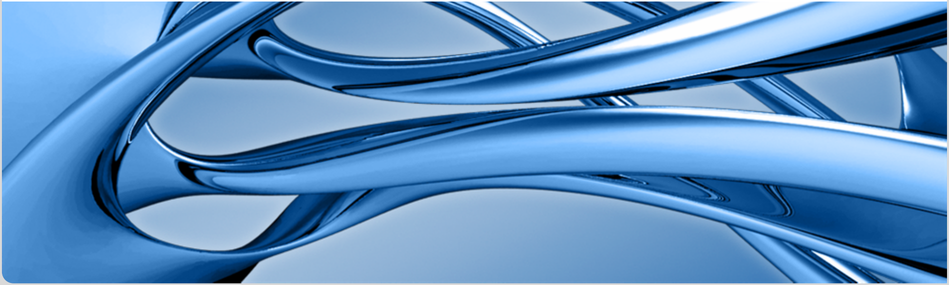
Karlsruher Institut für Technologie

Splitting-Verfahren für dynamische Niedrigrang-Approximationen

Marlis Hochbruck und Markus Neher

KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE (KIT)



Problemstellung

Motivation

Geg.: Wellengleichung für $u = u(t, x, y)$:

$$u_{tt} = u_{xx} + u_{yy} \;\text{ in } [x_0, x_m] \times [y_0, y_n]$$

mit $x_m = x_0 + mh$, $y_n = y_0 + nh$ sowie AB und periodische RB.

Ortsdiskretisierung mit FD liefert Matrix-DGl für $A(t) = \big(a_{ij}(t)\big)$. Löse

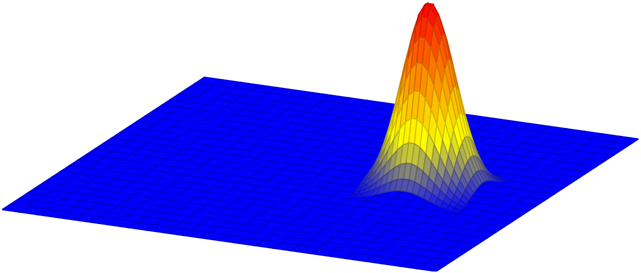
$$a_{ij}'' = \frac{1}{h^2}\Big(a_{i,j-1} + a_{i-1,j} - 4a_{ij} + a_{i+1,j} + a_{i,j+1}\Big),$$

$$i = 1, \dots, m, \; j = 1, \dots, n,$$

und erhalte $u(t, x_i, y_j) = a_{ij}(t) + O(h^2)$.

Motivation

Speziell: Probleme mit räumlich begrenzter Lösung für alle $t \in [t_0, T]$, z.B. wandernder Gauß-Puls:



Motivation

Allgemein: Matrix-Dgl

$$(A) \quad A'(t) = F\big(A(t)\big), \quad A(t_0) = A_0$$

mit räumlich begrenzter Lösung für alle $t \in [t_0, T]$.

Für jedes $t \in [t_0, T]$ sind nur wenige a_{ij} ungleich Null.

Idee: Approximiere A_0 durch Matrix Y_0 mit niederem Rang und löse anstelle von (A)

$$(Y) \quad Y'(t) = G\big(Y(t)\big), \quad Y(t_0) = Y_0,$$

sodass $A(t) \approx Y(t)$ für alle $t \in [t_0, T]$ gilt.

Literatur

- Dynamische Niedrigrang-Approximation: **DLR**
- Koch und Lubich, DLR, SIMAX, 2007.$^{(\star)}$
- Kühl, DLR zur Lösung von Wellengleichungen, DA, Uni Düss., 2007.
- Lubich und Oseledets, A projector-splitting integrator for DLR, BIT, 2013.
- Rieger, Splitting-Verfahren für DLR, Diplomarbeit, KIT, 2014.

$(\star)$ $Y = USV^T$, DGI-System für U, S, V.

Problem: S^{-1} bei Überapproximation?

DLR nach Koch und Lubich

Notation

- $A(t) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, differenzierbar, $t \in [t_0, T]$.
- $\|.\| = \|.\|_F$.
- $\mathcal{M}_r = \{X \in \mathbb{R}^{m \times n} : \operatorname{rang} X \leq r\}$.
- $X(t)$ heißt Bestapproximation an $A(t)$ in $\mathcal{M}_r$

  $\iff \|X(t) - A(t)\| \stackrel{!}{=} \min$ für alle t.

  - Berechnung durch abgeschnittene SWZ.
  - I.A. nicht eindeutig (bei mehrfachen SWen).

DLR nach Koch und Lubich

- Geg.: $A(t) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $A'(t) = F\big(A(t)\big)$.
- Approximiation:
  - $Y_0 \in \mathcal{M}_r$, $Y_0 \approx A(t_0)$.
  - $\|Y'(t) - A'(t)\| \stackrel{!}{=}$ min für alle t (wenn $A(t)$ bekannt).
  - $\big\|Y'(t) - F\big(Y(t)\big)\big\| \stackrel{!}{=}$ min für alle t (wenn $A'(t) = F(A)$).
- Vorteile:
  - Aufwandsersparnis, insbesondere wenn $A'(t)$ dünner besetzt ist als $A(t)$.
  - DGl sichert Glattheit von $Y(t)$.
  - Anwendung auf DGl ohne Berechnung von $A(t)$.

DLR nach Koch und Lubich

- Zunächst: $A(t)$ sei bekannt, suche $Y(t)$ mit $\|Y - A\| \approx \|X - A\|$.
- Beachte: Gute glatte Approximation ist nicht immer möglich, siehe z.B. Rang-1-Approximation von

$$A(t) = \begin{pmatrix} e^t & 0 \\ 0 & e^{-t} \end{pmatrix}, \quad t \in [-10, 10].$$

- Methode:
  - Zerlegung

$$Y(t) = U(t)S(t)V^T(t), \quad U \in \mathbb{R}^{m \times r}, \; V \in \mathbb{R}^{n \times r}, \quad U^T U = V^T V = I_r.$$

  - Eindeutige Zerlegung durch Bedingungen in Tangentialräumen.

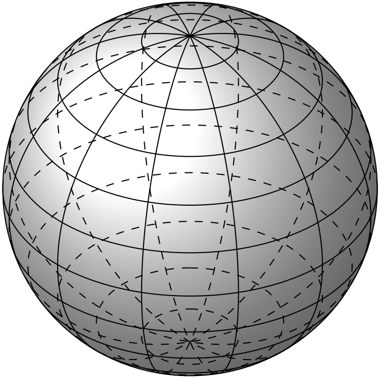
Tangentialräume

Tangentialraum

Karlsruher Institut für Technologie

- Differenzierbare Mannigfaltigkeit: $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^q$, $x \in \mathcal{M}$.
- Tangentialvektor: Ist $\gamma\colon (-\varepsilon, \varepsilon) \to \mathcal{M}$ eine differenzierbare Kurve mit $\gamma(0) = x$, dann ist $\dfrac{d\gamma}{dt}(0)$ ein Tangentialvektor an K und $\mathcal{M}$.
- Tangentialraum $\mathcal{T}_x\mathcal{M}$: Vektorraum aller Tangentialvektoren in x (lineare Approximation von $\mathcal{M}$ in x).
- $\dim \mathcal{T}_x\mathcal{M} = \dim \mathcal{M}$.

Beispiel: S^2



Stiefel-Mannigfaltigkeit

- Stiefel-Mannigfaltigkeit: $\mathcal{V}_{m,r} = \{U \in \mathbb{R}^{m\times r} \mid U^T U = I_r\}$.

- Tangentialraum: Differentiation von $U(t)^T U(t) = I_r$ liefert

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_U \mathcal{V}_{m,r} &= \{\delta U \in \mathbb{R}^{m\times r} \mid \delta U^T U + U^T \delta U = 0_r\} \\ &= \{\delta U \in \mathbb{R}^{m\times r} \mid U^T \delta U \in \mathrm{so}(r)\}. \end{aligned}$$

Beispiel: $\mathcal{T}_I\mathcal{V}_{33}$

Für

$$U_1(t) = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t & 0 \\ \sin t & \cos t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad U_2(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos t & -\sin t \\ 0 & \sin t & \cos t \end{pmatrix},$$

$U_3(t)$ analog, gilt $U_j(t) \in \mathcal{V}_{33}$ und $U_j(0) = I$. Es ist

$$\delta U_1(0) = \begin{pmatrix} -\sin t & -\cos t & 0 \\ \cos t & -\sin t & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_{\Big| t=0} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$\delta U_1(0), \delta U_2(0), \delta U_3(0)$ bilden eine Basis von $\mathcal{T}_I\mathcal{V}_{33} = \mathrm{so}(r)$.

Eindeutige Zerlegung: $Y = USV^T$

- Geg.: $A(t) \in \mathbb{R}^{m\times n}$.
- Gesucht: Rang-r-Approximation $Y(t) \in \mathbb{R}^{m\times n}$,
$$Y(t) = U(t)S(t)V^T(t), \quad U \in \mathbb{R}^{m\times r},\ V \in \mathbb{R}^{n\times r}, \quad U^TU = V^TV = I_r.$$
- $\delta Y = \delta USV^T + U\delta SV^T + US\delta V^T$.
- $\delta Y \in \mathcal{T}_Y\mathcal{M}_r, \quad \delta U \in \mathcal{T}_U\mathcal{V}_{m,r}, \quad \delta S \in \mathbb{R}^{r\times r}, \quad \delta V \in \mathcal{T}_V\mathcal{V}_{n,r}$.
- Notwendig:
$$U^T\delta U \in \mathrm{so}(r), \quad V^T\delta V \in \mathrm{so}(r).$$
- Eindeutig:
$$U^T\delta U \stackrel{!}{=} 0, \quad V^T\delta V \stackrel{!}{=} 0.$$

Approximationsproblem

- Erinnerung:

$$Y_0 \in \mathcal{M}_r,\ \ Y_0 \approx A(t_0); \quad \big\| Y'(t) - A'(t) \big\| \stackrel{!}{=} \min \text{ für alle } t.$$

- Gesucht: $Y'(t) \in \mathcal{T}_{Y(t)}\mathcal{M}_r$ mit $\| Y'(t) - A'(t) \| \stackrel{!}{=} \min.$

  Äquivalent: Orthogonalprojektion

$$< Y' - A', \delta Y >= 0 \quad \text{für alle } \ \delta Y \in \mathcal{T}_Y\mathcal{M}_r.$$

  $\Rightarrow Y'(t) = P\big(Y(t)\big)A'(t)$ mit

$$P(Y)Z = ZP_{\mathcal{R}(Y^T)} - P_{\mathcal{R}(Y)}ZP_{\mathcal{R}(Y^T)} + P_{\mathcal{R}(Y)}Z$$

  (Orthogonalprojektion auf $\mathcal{T}_Y\mathcal{M}_r$).

Approximationsproblem

Zu lösen: $Y'(t) = P\big(Y(t)\big)A'(t)$ mit

$$P(Y)Z = ZP_{\mathcal{R}(Y^T)} - P_{\mathcal{R}(Y)}ZP_{\mathcal{R}(Y^T)} + P_{\mathcal{R}(Y)}Z,$$

$$= ZVV^T - UU^TZVV^T + UU^TZ.$$

DLR-Splitting nach Lubich und Oseledets

Splitting-Verfahren

- Im Folgenden sei $\tau = t_1 - t_0$, $\Delta A = A_1 - A_0 = A(t_1) - A(t_0)$.
- $Y = USV^T$,

  $Y' = P(Y)A' = A'VV^T - UU^TA'VV^T - UU^TA'$.
- Lie-Trotter-Splitting:

  (i) Löse $Y_I' = A'V_IV_I^T, \quad Y_I(t_0) = Y_0,$

  (ii) Löse $Y_{II}' = -U_{II}U_{II}^TA'V_{II}V_{II}^T \quad Y_{II}(t_0) = Y_I(t_1),$

  (iii) Löse $Y_{III}' = U_{III}U_{III}^TA', \quad Y_{III}(t_0) = Y_{II}(t_1).$

  Diese AWPe sind exakt lösbar!

Exakte Lösung der AWPe

- (i) $Y_I' = A' V_I V_I^T, \quad Y_I(t_0) = Y_0 = U_0 S_0 V_0^T$:

$$(U_I S_I)' V^T + (U_I S_I) V'^T = A' V_I V_I^T$$

ist erfüllt für

$$(U_I S_I)' = A' V_I, \quad V_I' = 0.$$

Lösung: $\qquad (U_I S_I)(t_1) = U_0 S_0 + \Delta A V_0, \quad V_I(t_1) = V_0.$

Exakte Lösung der AWPe

- (ii) $Y_{II}' = -U_{II}U_{II}^T A' V_{II} V_{II}^T, \quad Y_{II}(t_0) = Y_I(t_1)$:

$$U_{II}' S_{II} V_{II}^T + U_{II} S_{II}' V_{II}^T + U_{II} S_{II} V_{II}'^T = -U_{II} U_{II}^T A' V_{II} V_{II}^T$$

ist erfüllt für

$$S_{II}' = -U_{II}^T A' V_{II}, \quad U_{II}' = 0, \quad V_{II}' = 0.$$

Lösung: $$S_{II}(t_1) = S_{II}(t_0) - U_I^T \Delta A V_0 = S_I(t_1) - U_I^T \Delta A V_0,$$

$$U_{II}(t_1) = U_I(t_1), \quad V_{II}(t_1) = V_I(t_1) = V_0.$$

Exakte Lösung der AWPe

- (iii) $\quad Y_{III}' = U_{III}U_{III}^TA', \quad Y_{III}(t_0) = Y_{II}(t_1)$:

$$U_{III}'S_{III}V_{III}^T + U_{III}(S_{III}V_{III}^T)' = U_{III}U_{III}^TA'$$

ist erfüllt für

$$(V_{III}S_{III}^T)' = A'^TU_{III}, \quad U_{III}' = 0.$$

Lösung: $\quad (V_{III}S_{III}^T)(t_1) = (V_{III}S_{III}^T)(t_0) + \Delta A^TU_{III},$

$$U_{III}(t_1) = U_{II}(t_1) = U_I(t_1).$$

Lie-Trotter-Splitting für A(t)

Geg.: $A(t) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, Rang-$r$-Approx $A(t_0) \approx Y_0 = U_0 S_0 V_0^T$.

Gesucht: Rang-r-Approximation $Y_1 \approx A(t_1)$.

Integrator 1. Ordnung, exakt für bekanntes $A(t)$:

$$K_I := U_0 S_0 + (A_1 - A_0) V_0$$

Reduzierte QR-Zerlegung : $\quad U_1 S_I = K_I, \quad S_I \in \mathbb{R}^{r \times r}$

$$S_{II} := S_I - U_1^T (A_1 - A_0) V_0$$

$$K_{III} := V_0 S_{II}^T + (A_1 - A_0)^T U_1$$

Reduzierte QR-Zerlegung : $\quad V_1 S_1^T = K_{III}, \quad S_1 \in \mathbb{R}^{r \times r}$

Approximation : $\quad Y_1 := U_1 S_1 V_1^T$

Folgerung 1: Strang-Splitting für A(t)

$A_0 = A(t_0)$, $A_{1/2} = A(t_0 + \frac{\tau}{2})$, $A_1 = A(t_0 + \tau)$.

$$K_I := U_0 S_0 + \left(A_{1/2} - A_0\right) V_0$$

Reduzierte QR-Zerlegung : $\quad U_{1/2} S_I = K_I, \quad S_I \in \mathbb{R}^{r \times r}$

$$S_{II} := S_I - U_{1/2}^T \left(A_{1/2} - A_0\right) V_0$$

$$K_{III} := V_0 S_{II}^T + \left(A_1 - A_0\right)^T U_{1/2}$$

Reduzierte QR-Zerlegung : $\quad V_1 S_{1/2}^T = K_{III}, \quad S_{1/2} \in \mathbb{R}^{r \times r}$

$$S_V := S_{1/2} - U_{1/2}^T \left(A_1 - A_{1/2}\right) V_1$$

$$K_{VI} := U_{1/2} S_V + \left(A_1 - A_{1/2}\right) V_1$$

Reduzierte QR-Zerlegung : $\quad U_1 S_1 = K_{VI}, \quad S_1 \in \mathbb{R}^{r \times r}$

Approximation : $\quad Y_1 := U_1 S_1 V_1^T$

Übertragung auf Matrix-DGl $A' = F(A)$

Folgerung 2: Lie-Trotter-Splitting für Matrix-DGl

Geg.: $A'(t) = F(A)$, Rang-r-Approximation $A(t_0) \approx Y_0 = U_0 S_0 V_0^T$.

Gesucht: Rang-r-Approximation $Y_1 \approx A(t_1)$.

Approximation: $\Delta A = A(t_1) - A(t_0) \approx \tau A'(t_0) = \tau F(A_0) \approx \tau F(Y_0)$.

Integrator 1. Ordnung:

$$K_I := U_0 S_0 + \tau F(Y_0) V_0$$

Reduzierte QR-Zerlegung : $\quad U_1 S_I = K_I, \quad S_I \in \mathbb{R}^{r\times r}$

$$S_{II} := S_I - \tau U_1^T F(Y_0) V_0$$

$$K_{III} := V_0 S_{II}^T + \tau \big(F(Y_0)\big)^T U_1$$

Reduzierte QR-Zerlegung : $\quad V_1 S_1^T = K_{III}, \quad S_1 \in \mathbb{R}^{r\times r}$

Approximation : $\quad Y_1 := U_1 S_1 V_1^T$

Folgerung 3: Strang-Splitting für Matrix-DGl

Implizites Verfahren 2. Ordnung:

$$
\begin{aligned}
A_{1/2} - A_0 &\approx \frac{\tau}{2} F(Y_0),\\
A_1 - A_{1/2} &\approx \frac{\tau}{2} F(Y_1),\\
A_1 - A_0 &\approx \frac{\tau}{2} \Big(F(Y_0) + F(Y_1) \Big).
\end{aligned}
$$

Approximation durch expliziten Algorithmus

Berechne $\widetilde{Y}_1 \approx A(t_1)$ mit Splitting-Verfahren 1. Ordnung für Matrix-DGl.

Ein explizites Verfahren 2. Ordnung erhält man aus

$$A_{1/2} - A_0 \approx \frac{3\tau}{8} F(Y_0) + \frac{\tau}{8} F(\widetilde{Y}_1),$$

$$A_1 - A_{1/2} \approx \frac{\tau}{8} F(Y_0) + \frac{3\tau}{8} F(\widetilde{Y}_1),$$

$$A_1 - A_0 \approx \frac{\tau}{2} \Big(F(Y_0) + F(\widetilde{Y}_1) \Big).$$

Übertragung auf Dgln 2. Ordnung

Splitting-Verfahren für DGl 2. Ordnung

- $$Y = USV^T,$$
  $$Y'' = P(Y)A'' = A''VV^T - UU^TA''VV^T - UU^TA''.$$
- Ansatz 1: Behandlung als System 1. Ordnung.
- Ansatz 2: Lie-Trotter-Splitting für DGl. 2. Ordnung:

  (i) Löse $Y_I'' = A''V_IV_I^T, \quad Y_I(t_0) = Y_0, \quad Y_I'(t_0) = Y_0',$

  (ii) Löse $Y_{II}'' = -U_{II}U_{II}^TA''V_{II}V_{II}^T \quad Y_{II}(t_0) = Y_I(t_1), \quad Y_{II}'(t_0) = Y_I'(t_1),$

  (iii) Löse $Y_{III}'' = U_{III}U_{III}^TA'', \quad Y_{III}(t_0) = Y_{II}(t_1), \quad Y_{III}'(t_0) = Y_{II}'(t_1).$

Beispiele (aus DA Rieger)

Beispiel 1: Molenkamp-Crowley-Test

$$u_t(t,x,y) + 2\pi y u_x(t,x,y) - 2\pi x u_y(t,x,y) = 0.$$

Homogene Dirichlet-RB:

$$u(t,x,y) = 0 \text{ für } (x,y) \in \partial\Omega.$$

Gauß-Puls als AB:

$$u(0,x,y) = \exp\Big(-10(x-0.5)^2 - 10(y-0.5)^2\Big).$$

Exakte Lösung:

$$u(t,x,y) = \exp\Big(-10\big(x - 0.5\cos(2\pi t)\big)^2 - 10\big(y - 0.5\sin(2\pi t)\big)^2\Big).$$

Beispiel 2: Wellengleichung

$$u_{tt} = u_{xx} + u_{yy} \ \text{ in } [-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi]$$

Spezielle Lösung: $\quad u(t, x, y) = \sin(\sqrt{2}t - x - y)$