

Shift-and-Invert-Approximation an $\varphi_\ell(\mathbf{A})\mathbf{v}$

Lena Martin

KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE (KIT)



- $\varphi_\ell(A)v, \ell \geq 0$
- A sehr groß, dünn besetzt, $\mathcal{F}(A) \subseteq \mathbb{C}_0^-$
- Shift-and-Invert: $\mathcal{K}_m((\gamma I - A)^{-1}, v)$
- Motivation
- Zusammenfassung bekannter Ergebnisse:
 - $A = A^H, \varphi_0(z) = e^z$
 - Schranken Tanja, Volker: $\varphi_\ell, \ell \geq 1, \mathcal{F}(A) \subseteq \mathbb{C}_0^-$
 - Novati: $\varphi_\ell, \ell \geq 0, \mathcal{F}(A) \subseteq \mathcal{S}_\theta, 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{3}$
- Eigene Ansätze

- ODE, Variation der Konstanten, Exponentielle Integratoren

$$y'(t) = Ay(t) + \frac{t^{\ell-1}}{(\ell-1)!}v, \quad y(0) = y_0$$

- In Lösung: Funktionen der Form

$$\varphi_0(z) = e^z, \quad \varphi_\ell(z) = \int_0^1 e^{(1-s)z} \frac{s^{\ell-1}}{(\ell-1)!} ds, \quad \ell \geq 1$$

- ODE, Variation der Konstanten, Exponentielle Integratoren

$$y'(t) = Ay(t) + \frac{t^{\ell-1}}{(\ell-1)!}v, \quad y(0) = y_0$$

- In Lösung: Funktionen der Form

$$\varphi_0(z) = e^z, \quad \varphi_\ell(z) = \int_0^1 e^{(1-s)z} \frac{s^{\ell-1}}{(\ell-1)!} ds, \quad \ell \geq 1$$

- Alternative Darstellung

$$\varphi_\ell(z) = \frac{e^z - t_{\ell-1}(z)}{z^\ell}, \quad t_{\ell-1}(z) = \sum_{n=0}^{\ell-1} \frac{z^n}{n!}$$

- hebbare Singularität: $\varphi_\ell(0) = \frac{1}{\ell!}$

- Shift-and-Invert-Krylovraum, $\gamma \notin \mathcal{F}(A)$

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}_m(A, v) &= \{p_{m-1}((\gamma I - A)^{-1})v, & p_{m-1} \in \mathcal{P}_{m-1}\} \\ &= \{r_{m-1}(A)v = \frac{p_{m-1}(A)}{(\gamma I - A)^{m-1}}v, & p_{m-1} \in \mathcal{P}_{m-1}\}\end{aligned}$$

- $S_m \approx V_m^H A V_m = \gamma I - H_m^{-1} - h_{m+1,m} V_m^H A v_{m+1} e_m^T H_m^{-1},$

- Shift-and-Invert-Krylovraum, $\gamma \notin \mathcal{F}(A)$

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}_m(A, v) &= \{p_{m-1}((\gamma I - A)^{-1})v, & p_{m-1} \in \mathcal{P}_{m-1}\} \\ &= \{r_{m-1}(A)v = \frac{p_{m-1}(A)}{(\gamma I - A)^{m-1}}v, & p_{m-1} \in \mathcal{P}_{m-1}\}\end{aligned}$$

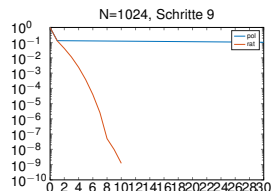
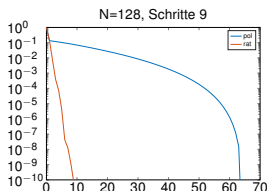
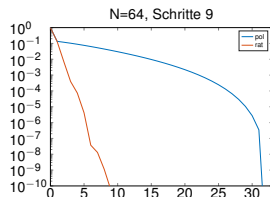
- $S_m \approx V_m^H A V_m = \gamma I - H_m^{-1} - h_{m+1,m} V_m^H A v_{m+1} e_m^T H_m^{-1},$
- $\varphi_\ell(A)v \approx \|v\| V_m \varphi_\ell(S_m) e_1$
- Berechnung von $\varphi_\ell(S_m) e_1$
 - S_m normal: diagonalisieren, `phi.m`
 - Trick: erweiterte Matrix $\tilde{S}_{m+\ell}$, `expm.m`, (Sidje 1998, Expokit)
- Im Weiteren: $\mathcal{F}(A) \subseteq \mathbb{C}_0^-, \quad \gamma > 0, \quad \|v\| = 1$

Spezialfall: $A = A^H$, $\varphi_0(A)v = e^A v$

- Hochbruck u. J.v.d.Eshof (2004), Moret u. Novati (2004)
- Potenzenmethode, Lanczos Verfahren für Eigenwerte
- $\lambda(-A) \subseteq \mathcal{F}(-A) = [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] \subset [0, \infty)$
- Spektrale Transformation:

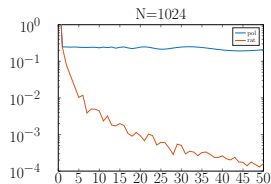
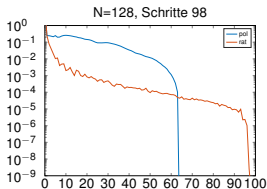
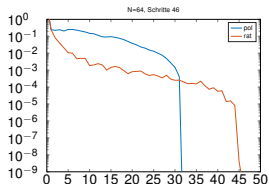
$$\lambda((\gamma I - A)^{-1}) \subseteq \mathcal{F}((\gamma I - A)^{-1}) = \left[\frac{1}{\lambda_{\max} + \gamma}, \frac{1}{\lambda_{\min} + \gamma} \right] \subseteq (0, \frac{1}{\gamma}]$$

- $f_\gamma(t) = e^{\gamma - t^{-1}}, \quad t \in (0, \frac{1}{\gamma}]$



- $e^{tA_N}v$, mit $A_N = N^2 \text{tridiag}(1, -2, 1) \in \mathbb{R}^{N-1 \times N-1}$, $t = 0.025$
- $\mathcal{F}(A_N) \rightarrow (-\infty, -\pi^2]$
- Konvergenz der Shift-and-Invert-Approximation gitterunabhängig

Schrödingergleichung 1-D: Finite Differenzen



- $e^{itA_N}v$, mit $A_N = N^2 \text{tridiag}(1, -2, 1) \in \mathbb{R}^{N-1 \times N-1}$, $t = 0.025$
- $\mathcal{F}(A_N) \rightarrow i(-\infty, -\pi^2]$,
- Konvergenz ?

Resultate für $\varphi_\ell(A)v, \ell \geq 1$

Dissertation Tanja: Gitterunabhängige Konvergenz für $\varphi_\ell(A)v, \ell \geq 1$

$$\|\varphi_\ell(A)v - V_m \varphi_\ell(S_m) e_1\| \leq \frac{C(\ell, \gamma)}{m^{\ell/2}} \|v\|$$

Resultate für $\varphi_\ell(A)v, \ell \geq 1$

Dissertation Tanja: Gitterunabhängige Konvergenz für $\varphi_\ell(A)v, \ell \geq 1$

$$\|\varphi_\ell(A)v - V_m \varphi_\ell(S_m) e_1\| \leq \frac{C(\ell, \gamma)}{m^{\ell/2}} \|v\|$$

Ideen im Beweis:

- Reduktion auf skalares Approximationsproblem (Crouzeix, Neumann)

$$\|f(A)v - r_{m-1}(A)v\| \leq 2C \|v\| \sup_{z \in \Omega} |f(z) - r_{m-1}(z)|, \quad \mathcal{F}(A) \subseteq \Omega$$

- Möbiustransformation $T(z) = \frac{\gamma+z}{\gamma-\bar{z}} = w$
- $\varphi_\ell(z) = \varphi_\ell(T^{-1}(w)) = f_\gamma(w), \quad w \in \mathbb{D} \setminus \{-1\}$
- $\varphi_\ell(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} c, \ell > 0$, setze $f_\gamma(-1) = c$

Wahl des Shifts γ für $A = A^H$

- Für festen Grad m : Ergebnis von Saff, Schönhage u. Varga

$$e^{-t}, t \in [0, \infty), \quad r_m(t) = \frac{p_m(t)}{(1 + \frac{t}{m})^m}$$

d.h. wähle $\gamma := m$.

- Verschärfung durch Andersson: $\gamma = \frac{m}{\sqrt{2}}$

Wahl des Shifts γ für $A = A^H$

- Für festen Grad m : Ergebnis von Saff, Schönhage u. Varga

$$e^{-t}, t \in [0, \infty), \quad r_m(t) = \frac{p_m(t)}{(1 + \frac{t}{m})^m}$$

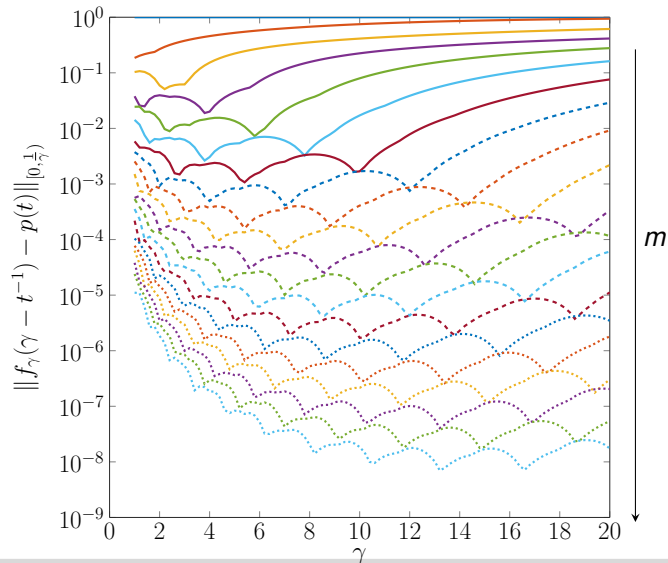
d.h. wähle $\gamma := m$.

- Verschärfung durch Andersson: $\gamma = \frac{m}{\sqrt{2}}$
- Shift-and-Invert, m i.A. nicht vorher bekannt Eshof u. Hochbruck
Ansatz über Bestapproximationsproblem:

$$\inf_{p \in \mathcal{P}_{m-1}} \sup_{t \in [0, \frac{1}{\gamma})} |f_\gamma(\gamma - t^{-1}) - p(t)|$$

- Remez-Algorithmus für reelle Bestapproximation
- Tabelle angegeben mit Toleranz und zug. γ_{opt}, m

Bestapproximation mit reeller CFM

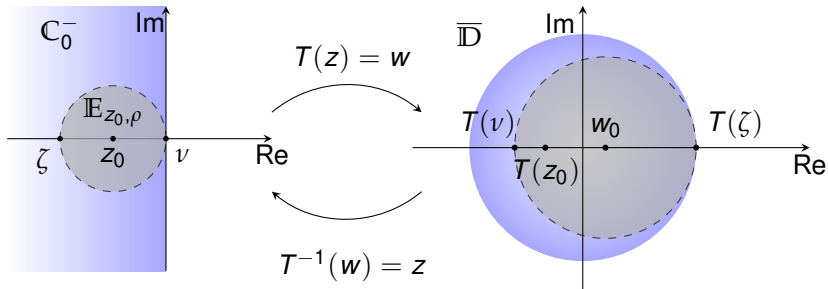


$\mathcal{F}(A)$ enthalten in einem Sektor S_θ

Moret u. Novati, Restricted Denominator rational Arnoldi method

- A sektorieller Operator: $\mathcal{F}(A)$ in Sektor $S_\theta, \theta \leq \frac{\pi}{3}$
- $\frac{m+2\ell}{2\cos(\theta)} \leq \gamma_{opt} \leq \frac{m+\ell}{\gamma}$
- Nutzt Gitterunabhängigkeit für Wahl von γ :
 - 1 Grobe Diskretisierung um m abzuschätzen
 - 2 setze γ gemäß oben
- RD-Method nicht sehr empfindlich für Wahl von γ

- Heuristischen Ansatz verallgemeinern auf $A \neq A^H$, $\mathcal{F}(A) \subseteq \mathbb{C}_0^-$,
- Genauer: $\mathcal{F}(A)$ innerhalb eines Kreises, Ellipse, Sektor, Polygon
- Ansatz analog zu Hochbruck u. Eshof
 - Möbiustransformation $\rightarrow$ polynomiale Bestapproximation



■ Carathéodory- Fejér Approximationen

- 1 FFT zur Bestimmung von Taylorkoeffizienten $\rightarrow$ Hankelmatrix C
- 2 Singulärwertzerlegung von C
- 3 Rechter Singulärvektor enthält Koeffizienten eines Blaschkeprodukt
- 4 Koeffizientenvergleich $\rightarrow$ Near-Best-Approximation

■ Javed, Trefethen: CCF.m - 30 Jahre alt

- Carathéodory- Fejér Approximationen

- 1 FFT zur Bestimmung von Taylorkoeffizienten $\rightarrow$ Hankelmatrix C
- 2 Singulärwertzerlegung von C
- 3 Rechter Singulärvektor enthält Koeffizienten eines Blaschkeprodukt
- 4 Koeffizientenvergleich $\rightarrow$ Near-Best-Approximation

- Javed, Trefethen: `CCF.m` - 30 Jahre alt

Problem:

- Polynomiale Variante: Pole von f_γ nahe $\mathbb{D}$
- Rationale Variante: Pole nicht frei wählbar

Idee: Nutze Near-Best-Eigenschaft aus

$$\|f(A)v - r_{m-1}(A)v\| \leq 2C \|v\| \inf_{r \in \mathcal{R}_{m-1}} \sup_{z \in \Omega} |f(z) - r_{m-1}(z)|, \quad \mathcal{F}(A) \subseteq \Omega$$

$$\mathcal{Q}_m(A, v) = \{r_{m-1}(A)v = p_{m-1}(\overbrace{(\gamma I - A)^{-1}}^{:=B})v, p_{m-1} \in \mathcal{P}_{m-1}\}$$

- $K_m = (v, Bv, B^2v, \dots, B^{m-1}v)$
- $V_m = K_m R_m$, R_m obere Dreiecksmatrix
- $\tilde{p}_{m-1}(B)v = V_m \varphi_\ell(S_m) e_1 = K_m R_m \varphi_\ell(S_m) e_1 = K_m (a_0, a_1, \dots, a_{m-1})^T$
- Koeffizienten von $\tilde{p}_{m-1}$

- Geeignete Diskretisierung Ω_d von Ω ,
→ Diagonalmatrix D , $v = (1, \dots, 1)^T$
- $\mathcal{Q}_{m-1}(D, v) \rightarrow \tilde{p}$
- Setze feinere Diskretisierung Ω_D in $\tilde{p}$ ein, berechne

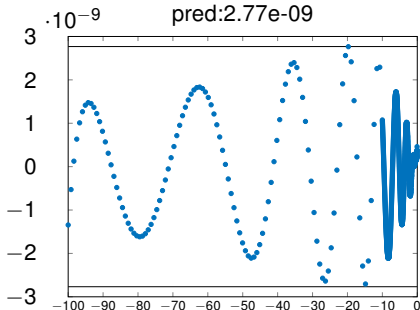
$$E_\gamma^m = \max_{\Omega_D} \|\varphi_\ell(z) - \tilde{p}_m(z)\|$$

- Suche γ, m , sodass $E_\gamma^m \stackrel{!}{=} \min$

Diskretisierung von Ω

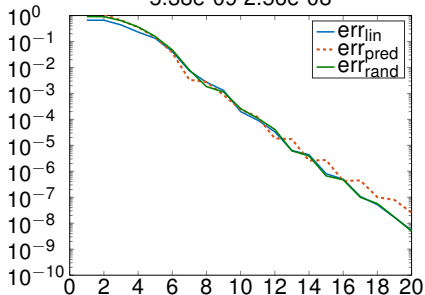
$$\|r(z) - \varphi_0(z)\|_{\infty} = 2.77e-09$$

pred:2.77e-09



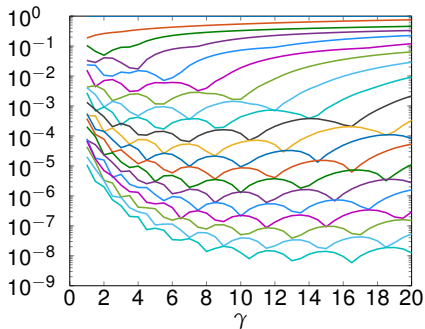
Krylov error vs. pred error

5.38e-09 2.56e-08

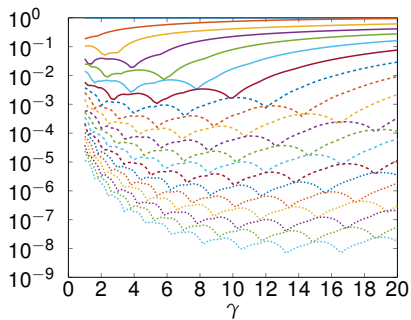


Remez vs. Diskretisierung von Ω

Diagonalmatrix-Ansatz



Remez-Algorithmus



Diagonalmatrix-Ansatz

$\ err\ $	$\ \gamma_{opt}\ $	m
0.050946	2.2	3
0.018913	3.8	4
0.0026376	3.8	6
0.0010714	5.4	7
0.00041553	7	8
6.7163e-05	7	10
9.6903e-06	10.2	12
6.7773e-07	11.8	15
1.7816e-08	14.8	19
7.0254e-09	13.2	20

Remez-Algorithmus

$\ err\ $	$\ \gamma_{opt}\ $	m
0.021008	2.551	3
0.0048412	1	4
0.0011041	4.102	6
9.62e-05	2.9388	7
0.0001932	7.2041	8
2.4458e-05	7.2041	10
4.6717e-06	10.306	12
4.5104e-08	11.857	17
7.7198e-09	14.959	19
2.9625e-09	13.408	20

Diagonalmatrix-Ansatz $\Omega = S_\theta$

