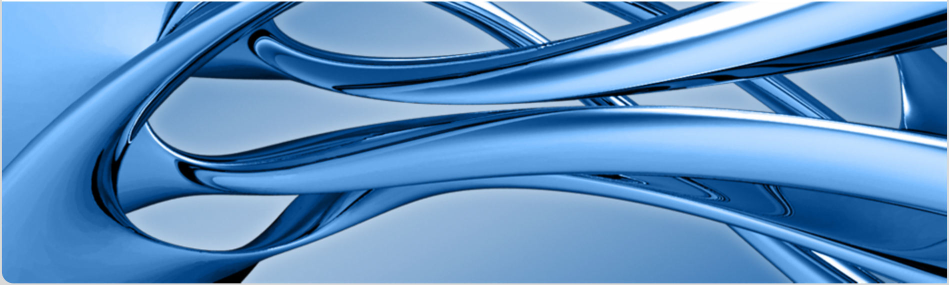
Karlsruher Institut für Technologie

Dynamische Niedrigrang-Approximationen für Differenzialgleichungen zweiter Ordnung

Marlis Hochbruck und Markus Neher

KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE (KIT)



Problemstellung

Motivation

Geg.: 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.

$(\star)$ $Y = USV^T$, DGl-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, $t \in [t_0, T]$.
- $\|.\| = \|.\|_F$.
- $\mathcal{M}_r = \{X \in \mathbb{R}^{m\times n} : \operatorname{rang} X \leq r\}$.
- Bestapproximation $X(t) \in \mathcal{M}_r$ an $A(t)$: $\|X(t) - A(t)\| \stackrel{!}{=} \min \ \forall t$.
  - Berechnung durch abgeschnittene SWZ.
  - I.A. nicht eindeutig (bei mehrfachen SWen), z.B.

$$\begin{pmatrix} \cos^2\varphi & \cos\varphi\sin\varphi \\ \cos\varphi\sin\varphi & \sin^2\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix} \cdot 1 \cdot \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix}^T, \quad \varphi \in [0, 2\pi),$$

sind Rang-1-Bestapproximationen von I.

DLR nach Koch und Lubich

- Geg.: $A(t) \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $A'(t) = F\big(A(t)\big)$.
- Approximation:
  - $Y_0 \in \mathcal{M}_r$, $Y_0 \approx A(t_0)$.
  - $\|Y'(t) - A'(t)\| \stackrel{!}{=}$ 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

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

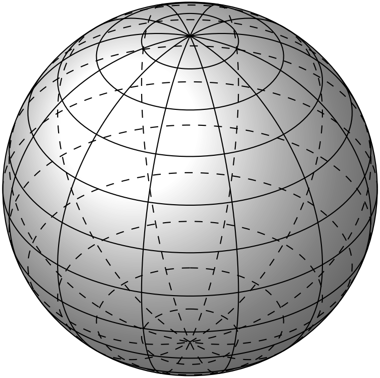
  - Eindeutige Zerlegung durch Bedingungen in Tangentialräumen.

Tangentialräume

Tangentialraum

- 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 $\frac{d\gamma}{dt}(0)$ 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: $\mathcal{V}_{m,r} = \left\{ U \in \mathbb{R}^{m\times r} \mid U^T U = I_r \right\}$.

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

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

- Speziell $m = 2, r = 1, U = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \end{pmatrix}^T$:

$$\mathcal{T}_U \mathcal{V}_{21} = \left\{ \delta U \in \mathbb{R}^{2\times 1} \mid U^T \delta U = 0 \right\} = \left[\begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \end{pmatrix} \right].$$

- Speziell $m = r = 3, U = I$,

$$\mathcal{T}_I \mathcal{V}_{33} = \left\{ \delta U \in \mathbb{R}^{3\times 3} \mid \delta U \in \mathrm{so}(3) \right\}.$$

Eindeutige Zerlegung: $Y = USV^T$

- Geg.: $A(t) \in \mathbb{R}^{m \times n}$.
- Gesucht: Rang-r-Approximation $Y(t) \in \mathbb{R}^{m \times n}$,

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

- $\delta Y = \delta U S V^T + U \delta S V^T + U S \delta V^T$.
- $\delta Y \in \mathcal{T}_Y \mathcal{M}_r, \quad \delta U \in \mathcal{T}_U \mathcal{V}_{m,r}, \quad \delta S \in \mathbb{R}^{r \times r}, \quad \delta V \in \mathcal{T}_V \mathcal{V}_{n,r}$.
- 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:

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

- 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

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

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

Approximationsproblem

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

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

$$= CVV^T - UU^TCVV^T + UU^TC.$$

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

Karlsruher Institut für Technologie

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

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

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) $\quad Y'_{III} = U_{III} U_{III}^T A', \quad Y_{III}(t_0) = Y_{II}(t_1)$:

$$U'_{III} S_{III} V_{III}^T + U_{III}(S_{III} V_{III}^T)' = U_{III} U_{III}^T A'$$

ist erfüllt für

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

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

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

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

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

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

Übertragung auf Dgln 2. Ordnung

Ansatz 1: Behandlung als System 1. Ordnung

- Gegeben: $A'' = F(A)$.
- Idee: Wende Integrator auf

$$\left.\begin{aligned} A' &= B \\ B' &= F(A) \end{aligned}\right\} \quad \Longleftrightarrow \quad C' = G(C)$$

  an.
- Beobachtung (Rieger): Langzeitintegration bricht früher ab.

  Vermutung: Änderung des numerischen Rangs durch Differenziation:

$$A(t) = \begin{pmatrix} f(t) & f(t) + \varepsilon_1(t) \\ g(t) & g(t) + \varepsilon_2(t) \end{pmatrix} \Rightarrow A'(t) = \begin{pmatrix} f'(t) & f'(t) + \varepsilon_1'(t) \\ g'(t) & g'(t) + \varepsilon_2'(t) \end{pmatrix}.$$

Ansatz 2: Rang-r-Bestapproximation von A''

Karlsruher Institut für Technologie

- Gegeben: $A'' = F(A)$.

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

  $\Rightarrow Y = USV^T, \quad Y'' = P(Y)A'' = A''VV^T - UU^TA''VV^T - UU^TA''$.

- Lie-Trotter-Splitting („Lie-Trotter vor Störmer-Verlet“):

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

Exakte Lösung der AWPe zu $A'' = F(A)$

- (i) $\quad Y_I'' = A'' V_I V_I^T, \quad Y_I(t) = U_I(t) S_I(t) V_I^T(t)$:

$$(U_I S_I)'' V^T + 2(U_I S_I)' V'^T + (U_I S_I) V''^T = A'' V_I V_I^T$$

ist erfüllt für

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

- Analog: (ii) ist erfüllt für

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

(iii) ist erfüllt für

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

Exakte Lösung der AWPe zu $A'' = F(A)$

- Löse also:

$$\big(U_I(t)S_I(t)\big)'' = F\big(Y(t)\big)V_I,$$

$$S_{II}''(t) = -U_{II}^T F\big(Y(t)\big)V_{II},$$

$$\big(V_{III}(t)S_{III}^T(t)\big)'' = F\big(Y(t)\big)^T U_{III}.$$

- Anfangswerte:

$$(US)' = A'V, \quad S' = U^T A' V, \quad (VS^T)' = (A^T)'U.$$

- Problem: Iteration für $(US)', S', (VS^T)'$.

Ansatz 3: Störmer-Verlet vor Lie-Trotter

- Gegeben: $A'' = F(A)$.
- Idee: Verwende zwei Rang-r-Approximationen

$$A \approx Y = USV^T, \quad A' \approx Z = TRW^T,$$

und löse $Y'' = F(Y)$ mit Störmer-Verlet:

$$Z' = F(Y) \ \text{in } \left[t_0, t_0 + \frac{h}{2}\right] \text{ mit expl. Euler,}$$

$$\text{for } k = 1, \dots, n-1:$$

$$\begin{cases} Y' = Z \ \text{in } [t_{k-1}, t_k] \text{ mit MP-Verfahren,} \\ Z' = F(Y) \ \text{in } \left[t_{k-\frac{1}{2}}, t_{k+\frac{1}{2}}\right] \text{ mit MP-Verfahren,} \end{cases}$$

$$Y' = Z \ \text{in } \left[t_{n-\frac{1}{2}}, t_n\right] \text{ mit impl. Euler.}$$

Ansatz 3: Störmer-Verlet vor Lie-Trotter

- Gegeben: $A'' = F(A)$.
- Idee: Verwende zwei Rang-r-Approximationen

$$A \approx Y = USV^T, \quad A' \approx Z = TRW^T,$$

  und löse $Y'' = F(Y)$ mit Störmer-Verlet.
- Jedes AWP $Z' = F(Y)$, $Y' = Z$ lösbar mit Lie-Trotter-Splitting.
- Gute Langzeitintegration in (wenigen) numerischen Beispielen.