Note Title 2020-04-24

Calcolare funzioni di matrici con Arnoldi

$$AV_n = V_{n+1}\underline{H}_n \qquad V_n = [v_1\ v_2\ \cdots\ v_n] \text{ base o.n. di } K_n(A,b)$$

$$= \{p(A)b : \deg p < n\}$$

$$\underline{H}_n = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \cdots & \times \\ \times & \ddots & & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \times \\ & & & & \times \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{(n+1)\times n} \qquad H_n \in \mathbb{C}^{n\times n}$$

$$H_n = V_n^* A V_n$$

$$\left(\text{perché } V_n^* V_{n+1} = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & \ddots & & \vdots \\ & & 1 & 0 \end{bmatrix}\right)$$

Lemma:

$$p(A)b = V_n\, p(V_n^* A V_n) V_n^* b = V_n\, p(H_n)\, e_1 \|b\| \quad \text{per ogni } p \text{ di } \boxed{\text{grado} < n}$$

$V_nV_n^* =$ proiez. ord. su $K_n(A,b)$

dim: basta farlo per $A^j b = V_n (V_n^* A V_n)^j V^* b$

$$V_n (V_n^* A V_n)^j V_n^* b = V_nV_n^*AV_nV_n^*AV_nV_n^* \cdots AV_nV_n^*A\underbrace{\underbrace{\underbrace{V_nV_n^* b}_{b}}_{Ab}}_{A^2b} = \cdots$$

$$\cdots = V_nV_n^* A^j b = A^j b \qquad (\text{finché } j < n) \qquad \square$$

Arnoldi approximation of $f(A)b$:

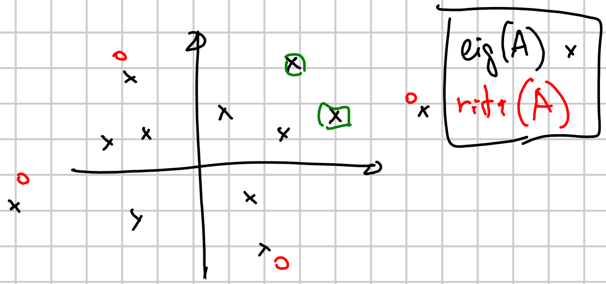
$$\underset{\substack{\uparrow \\ m\times m,\ \text{grande, sparsa}}}{f(A)}b \approx V_n\, \underset{\substack{\uparrow \\ n\times n \text{ densa}}}{f(H_n)}\, e_1\|b\| = V_n\, \tilde{p}(H_n)\, e_1 \|b\| = \tilde{p}(A) b$$

$\tilde{p}$ pol. di interp. di f sullo spettro di H_n (di grado $< n$)

Arnoldi approx $\equiv$ rimpiazzare f con $\tilde{p}$ di interp. sullo spettro di H_n (valori di Ritz di A)

È noto che i valori di Ritz approssimano alcuni autoval. di A (tipicamente, i più esterni dello spettro)

Funzionerà bene se (1) faccio abbastanza passi
(2) la funzione assume val. maggiori sugli autoval. "esterni"



Costo di Arnoldi: n prodotti mat-vec con A + $O(mn^2)$

Come posso migliorarlo? Cambiando il mio spazio di approssimazione V_n

Varianti di Arnoldi:

1) Extended Arnoldi: costruisce una base ortonorm.

$$\{p(A)b \; : \; p = \alpha_{-n_1} x^{-n_1} + \alpha_{-n_1+1} x^{-n_1+1} + \dots + \alpha_0 + \alpha_1 x + \dots + \alpha_{n_2-1} x^{n_2-1} : \alpha_i \in \mathbb{C}\}$$

(dim. n_1+n_2)

$= K_{n_1,n_2}(A,b)$ Extended Krylov sp.

$$= A^{-n_1} K_{n_1+n_2}(A,b) = K_{n_1+n_2}(A, A^{-n_1} b)$$

2) Rational Arnoldi: dato $q_{n-1}(z)$ di grado $n-1$, costruisce base ortonorm.

$$\{r(A)b : r(z) = p(z)/q_{n-1}(z), \; \deg p < n\} = Q_n(A,b)$$

(dim. n)

$$= q_{n-1}(A)^{-1} K_n(A,b) = K_n(A, q_{n-1}(A)^{-1} b)$$

Come ne calcoliamo basi?

Se $n_2 = 1$ (solo potenze negative), allora lo spazio è

$$p(A)b : \; p(z) = \alpha_{-n_1} z^{-n_1} + \dots + \alpha_1 z^{-1} + \alpha_0 \quad = \text{polinomi in } z^{-1}$$

$= K_{n_1+1}(A^{-1}, b)$ (Arnoldi su A^{-1}, sol. sist. lin. a ogni passo)

Idea: posso costruire la base aggiungendo potenze una per volta

e.g. $\alpha_{-1} z^{-1} + \alpha_0 + \alpha_1 z \to \alpha_{-2} z^{-2} + \alpha_{-1} z^{-1} + \alpha_0 + \alpha_1 z$

Ad ogni passo, scelgo $v \in \operatorname{span} V_j$, faccio il prodotto

$$\begin{cases} A^{-1} v & \text{se voglio aggiungere una pot. negativa} \\ A v & \text{" " " " " positiva} \end{cases}$$

In termini di polinomi, scelgo

$$v = (\alpha_{-1} A^{-1} + \alpha_0 I + \alpha_1 A) b \qquad (\alpha_{-1} \neq 0)$$
$$A^{-1} v = (\alpha_{-1} A^{-2} + \alpha_0 A^{-1} + \alpha_1 I) b$$

Basta scegliere a ogni passo un vett. di continuazione v che abbia una comp. non-nulla nella "direzione" giusta.

Scelgo $v = v_k$, dove k è l'ultima iterazione dove ho aggiunto una pot. dello stesso tipo.

Es. $v_1 = \frac{b}{\|b\|}$ $\quad v_2, v_4, v_6$ = pot. positive $\quad$ al passo 7, $v = v_3$

$\quad v_3, v_5, v_7$ = pot. negative

Ext. Arn. costruisce fattorizz. della forma

$$\underset{m \times m}{A} \underset{m \times (n+1)}{V_{n+1}} \underset{(n+1) \times n}{\underline{K_n}} = \underset{m \times (n+1)}{V_{n+1}} \underset{(n+1) \times n}{\underline{H_n}}$$

Rational Arnoldi: parto da un polinomio

$$q_{j-1} = (z - \xi_1)(z - \xi_2) \cdots (z - \xi_{j-1})$$

ξ_i = poli delle fun. razionali che consideriamo (ξ_i anche ripetuti)

Estendiamo lo spazio, e aggiungiamo un nuovo polo ξ_j

$$\operatorname{span} V_j = \left\{ r(A) b : r = \frac{p}{q_{j-1}} : \deg p < j \right\}$$

$$\operatorname{span} V_{j+1} = \left\{ r(A) b : r = \frac{p}{q_j} : \deg p < j+1 \right\} \qquad q_j(z) = q_{j-1}(z)(z - \xi_j)$$

A ogni passo, scegliamo un continuation vector $v \in \operatorname{span} V_j$, calcoliamo $w = (A - \xi_j I)^{-1} v$, e lo ortogonalizziamo rispetto a tutti i vettori precedenti. Se $v = p(A) q_{j-1}(A)^{-1} b$, per qualche $p(z)$ allora

$$w = (A - \xi_j I)^{-1} v = \tilde{p}(A)\, q_j(A)^{-1} b \quad \text{per un nuovo } \tilde{p}(z)$$

(Cambiando leggermente la formula di cont., $w = (I - A/\xi_j)^{-1} A v$,

possiamo anche avere $\xi_j = \infty$, i.e. stiamo "aggiungendo" grado 1 a p ma non al denominatore

(Arnoldi "normale" è un caso particolare di Rat. Arnoldi con $\xi_1 = \xi_2 = \dots = \xi_n = \infty$.)

Costo per passo: risolvere un sist. lineare (shiftato) con A

$$(A - \xi_j I)^{-1} v$$

Costa più di Arnoldi normale (1 sol. sist. lin. per passo)

Una volta ottenuto V_n (da una qualunque variante),

$$f(A)b = V_n f(V_n^* A V_n) V_n^* b$$

$$A_n = V_n^* A V_n$$

<u>Teo</u>: supponiamo $q_{n-1}(A_n)$ invertibile, allora

$$V_n f(A_n) V_n^* b = \tilde{r}(A) b, \quad \text{dove } \tilde{r}(z) = \frac{\tilde{p}(z)}{q_{n-1}(z)}$$ è una fun. razionale che interpola f sullo spettro di A_n

$$\left(\tilde{r}(\lambda) = f(\lambda) \quad \forall \lambda \in \Lambda(A_n) \right)$$

[Güttel '13]

$$[V, K, H] = \text{rat\_krylov}(A, b, [1, 2, 3])$$

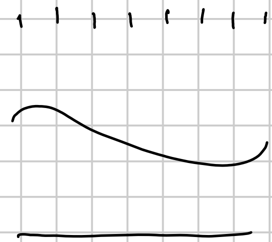
V = base o.n. dello spazio $\left\{ r(A)b : r = \frac{p(z)}{(z-1)(z-2)(z-3)}, \deg p \leq 3 \right\}$

V = base dello spazio $\left\{ p(A)b : p(z) = \alpha_{-5} z^{-5} + \alpha_{-4} z^{-4} + \dots + \alpha_{-1} z^{-1} + \alpha_0 + z + \dots + \alpha_4 z^4 + \alpha_5 z^5 \right\}$

$\xi_1 = \xi_2 = \xi_3 = \xi_4 = \xi_5 = 0$ $\qquad$ $\xi_6 = \xi_7 = \xi_8 = \xi_9 = \infty$
$= \xi_{10}$

$$x_{k+1} = f(x_k)$$

$$\frac{d}{dt} x(t) = f(x)$$



$$x_{k+1} = A x_k + f \qquad x : \mathbb{N} \to \mathbb{R}^n \qquad A \in \mathbb{R}^n$$

$$\frac{d}{dt} x(t) = A x + f \qquad x : [0, \infty) \to \mathbb{R}^n \qquad A \in \mathbb{R}^{n \times n}$$