Paolo Novati

Metodi polinomiali per il calcolo di funzioni di matrici non simmetriche e di grandi dimensioni

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. **4-A**—*La Matematica nella Società e nella Cultura* (2001), n.3 (Fascicolo Tesi di Dottorato), p. 515–518.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2001_8_4A_3_515_0>

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2001.

Bollettino U. M. I.
La Matematica nella Società e nella Cultura
Serie VIII, Vol. IV-A, Dicembre 2001, 515-518

Metodi polinomiali per il calcolo di funzioni di matrici non simmetriche e di grandi dimensioni.

Paolo Novati

Data una matrice reale A di ordine N ed un vettore N-dimensionale v, nella tesi vengono proposti alcuni metodi di tipo polinomiale per il calcolo di

$$y = f(A)\, v, \tag{1}$$

in cui f è una funzione analitica in un certo dominio del campo complesso contenente lo spettro di A, $\sigma(A)$. La matrice A viene generalmente assunta non simmetrica e di grandi dimensioni. Questo tipo di problema riveste una certa importanza in numerose applicazioni pratiche, in particolar modo nel campo dei problemi differenziali.

Un metodo polinomiale per il calcolo di $f(A)\, v$ è un metodo in cui le approssimazioni sono del tipo

$$y_m = p_{m-1}(A)\, v \approx f(A)\, v, \qquad m \geq 1, \tag{2}$$

dove p_{m-1} è un polinomio di grado al più $m-1$.

Generalizzando alcune idee introdotte per la risoluzione dei sistemi lineari con i metodi di tipo Krylov, recentemente alcuni autori hanno proposto metodi per il calclo di (1) basati sulla proiezione dell'operatore $f(A)$ sugli spazi di Krylov generati da A e v,

$$K_m = span\,\{v, Av, \ldots, A^{m-1} v\},$$

che vengono costruiti usando gli algoritmi di Arnoldi o di Lanczos (vedi [3], [4]). Queste tecniche sono di tipo polinomiale, e, dal punto di vista della velocità di convergenza in relazione al numero di passi m, risultano essere piuttosto valide. Tuttavia, l'uso di questi metodi presenta gli svantaggi tipici delle tecniche di tipo proiettivo, dovuti essenzialmente alla costruzione degli spazi di Krylov. In particolare, utilizzando l'algoritmo di Arnoldi sussiste il non trascurabile problema della crescita del costo computazionale ad ogni passo. Usando invece l'algoritmo di Laczos c'è la possibilità di fallimento totale del metodo e, in generale, ci sono seri problemi di instabilità dovuti al fatto che l'algoritmo utilizza proiezioni di tipo obliquo. Un altro svantaggio di questi metodi risiede nella dipendenza stretta dal vettore v, nel senso che gli spazi di Krylov vengono costruiti usando v come vettore di innesco, e questo può essere un problema quando è necessario calcolare $f(A)\, v$ con molti v diversi.

Seguendo un approccio diverso, nella tesi vengono studiati metodi polinomiali basati sull'approssimazione di f attraverso speciali polinomi definiti su un certo compatto del piano complesso contenente $\sigma(A)$, e in cui f è analitica. Più in dettaglio, dato un certo compatto $\Omega \subset \mathbf{C}$ tale che $\sigma(A) \subsetneq \Omega$, vengono studiati metodi di tipo (2) in cui i polinomi p_{m-1}, $m \geqslant 1$, approssimano in qualche modo f su Ω. In questo modo, vengo estese alcune idee sulle quali si basano i metodi semi-iterativi per la risoluzione dei sistemi lineari [2].

Per ottenere la convergenza di un metodo di questo tipo, ovvero

$$\lim_{m\to\infty} \|e_m\| = 0, \qquad e_m p_{m-1}(A)\, v - f(A)\, v,$$

non sempre è sufficiente che la sequenza di polinomi $\{p_{m-1}\}_{m\geqslant 1}$ sia tale che

$$\|p_{m-1} - f\|_\Omega \to 0\,,$$

dove $\|\cdot\|_\Omega$ è la norma uniforme. Una condizione sufficiente per la convergenza è che la sequenza $\{p_{m-1}\}_{m\geqslant 1}$ si comporti asintoticamente come la sequenza di polinomi di miglior approssimazione uniforme $\{p^*_{m-1}\}_{m\geqslant 1}$, ovvero,

$$\overline{\lim_{m\to\infty}} \|p_{m-1} - f\|_\Omega^{1/(m-1)} = \overline{\lim_{m\to\infty}} \|p^*_{m-1} - f\|_\Omega^{1/(m-1)}.$$

Questa proprietà è nota come convergenza massimale a f su Ω. Inoltre, per migliorare il più possibile le prestazioni di un metodo di questo tipo, è importante che Ω sia una buona approssimazione della convex hull di $\sigma(A)$. Come conseguenza, per ottenere metodi validi è necessario utilizzare sequenze $\{p_{m-1}\}_{m\geqslant 1}$ in grado di convergere massimalmente su compatti Ω di varie geometrie.

Dal punto di vista numerico, l'interesse è rivolto alla realizzazione di metodi le cui approssimazioni y_m, $m \geqslant 0$, siano computabili attraverso una formula ricorsiva ad un numero finito di termini.

Tenendo conto di queste richieste, in questo alvoro vengono studiati tre metodi: il metodo basato sulle serie di Faber troncate (FSM), il metodo basato sulle serie di Chebyshev troncate (CSM), e il metodo basato sull'interpolazione nei nodi di Fejèr (FPM).

Nel metodo FSM, i polinomi p_{m-1}, $m \geqslant 1$, sono le serie di Faber troncate rispetto ad Ω e alla funzione f

$$p_{m-1}(z) := \sum_{j=0}^{m-1} a_j(\Omega, f)\, F_j(z),$$

dove $F_j(z)$ è il j-esimo polinomio di Faber definito su Ω e $a_j(\Omega, f)$ è il j-esimo coefficiente di Faber. Questa tecnica è già stata considerata nell'ambito della risoluzione dei sistemi lineari [1], in cui $f(z) = 1/z$, e risulta essere particolarmente efficiente grazie alle proprietà dei polinomi di Faber che consentono di ottenere convergenza massimale senza restrizioni sulla geometria di Ω. Dal punto di vista numerico, poichè i polinomi di Faber soddisfano un relazione ricorsiva, questa ricorsione si riflette sul calcolo delle approssimazioni y_m, $m \geqslant 0$. Nel caso particolare in cui A sia simmetrica (anti-simmetrica), $\sigma(A)$ è contenuto in un intervallo reale (immaginario) $[\alpha, \beta]$, i cui polinomi di Faber associati si semplificano nei polinomi di Chebyshev opportunamente scalati e traslati. In particare, se $T_j(z)$ è il j-esimo polinomio di Chebyshev, su $[\alpha, \beta]$ si ha

$$F_j(z) = 2\left(\frac{\beta-\alpha}{4}\right)^j T_j\left(\frac{2z-(\alpha+\beta)}{\beta-\alpha}\right), \qquad j > 0.$$

Dunque, in questo caso il metodo FSM si semplifica nel CSM, in cui i polinomi p_{m-1}, $m \geqslant 1$, sono le serie di Chebyshev troncate rispetto a tale intervallo e alla funzione f. Lo stesso accade quando il bordo di Ω è un ellisse del piano complesso.

Il metodo FPM è un metodo di tipo interpolatorio, in cui i polinomi p_{m-1}, $m \geqslant 1$, interpolano f su un certo insieme di punti, i nodi di Fejèr, definiti sul compatto Ω contenente $\sigma(A)$. Indicando con ψ la mappa conforme relativa a Ω, ovvero ψ mappa $\overline{\mathbf{C}} \setminus \{w : |w| \leqslant 1\}$ in $\overline{\mathbf{C}} \setminus \Omega$ in modo conforme, i nodi di Fejèr sono definiti come le immagini attraverso ψ delle radici dell'unità. I punti di Fejèr rivestono una certa importanza nella teoria dell'approssimazione polinomiale complessa poichè permettono di ottenere convergenza massimale per la corrispondente sequenza di interpolanti, senza restrizioni sulla geometria di Ω [5]. Numericamente, la scelta di questi nodi permette di rappresentare gli interpolanti con la formula di Newton, e, come conseguenza, permette di calcolare le approssimazioni y_m, $m \geqslant 0$, con una formula ricorsiva a tre termini.

Riassumendo, le proprietà dei tre metodi che vengono studiati sono le seguenti:

1. se $\sigma(A) \subseteq \Omega$ e f è analitica su Ω, i metodi convergono. Inoltre, in base alla posizione delle singolarità di f al di fuori di Ω, i metodi possono convergere anche se $\sigma(A) \nsubseteq \Omega$; la convergenza è superlineare se f è analitica su tutto il piano complesso;

2. in tutti e tre i casi esiste una relazione ricorsiva per il calcolo di $y_m = p_{m-1}(A)\, v$;

3. la definizione dei parametri di iterazione è indipendente da v;

4. non è necessario calcolare esplicitamente alcuna funzione di matrice (questo ad esempio non vale per i medodi di tipo Krylov);

5. il costo ad ogni passo è costante ed è sostanzialmente quello di un applicazione di A.

Il principale svantaggio di questi metodi risiede nel fatto che sono necessarie alcune informazioni a priori sulla dislocazione nel piano complesso di $\sigma(A)$. Queste informazioni permettono infatti di costruire il compatto Ω contenente $\sigma(A)$ sul quale verrà costruito il metodo scelto. Quindi, per applicare un metodo di questo tipo è indispensabile una prima fase in cui si utilizza un metodo di stima degli autovalori. In letteratura, queste procedure composte sono generalmente note come metodi ibridi.

Oltre a quanto detto, nella tesi vengono studiati gli integratori esponenziali basati sui tre metodi proposti, per la risoluzione di problemi ai valori iniziali, e vengono presentati alcuni esempi numerici provenienti dalla semidiscretizzazione con il metodo delle linee di un equazione di tipo parabolico. Inoltre, viene presa in esame l'applicazione dei metodi al calcolo di $A^{-1}v$, $\sqrt{A}v$, $\ln(A)\,v$, $\cos(A)\,v$, $\exp(\sqrt{A})\,v$, $\cos(\sqrt{A})\,v$, $\cosh(\sqrt{A})\,v$, fornendo una serie di test nei quali questi metodi vengono confrontati con i metodi di Krylov basati sugli algoritmi di Arnoldi e Lanczos.

BIBLIOGRAFIA

[1] EIERMANN M., *On semiiterative methods generated by Faber polynomials*, Numer. Math., **56**, No. 2/3 (1989), 139-156.

[2] EIERMANN M., NIETHAMMER W., VARGA R. S., *A study of semiiterative methods for nonsymmetric systems of linear equations*, Numer. Math., **47** (1985), 505-533.

[3] GALLOPOULOS E., SAAD Y., *Efficient solution of parabolic equations by Krylov approximation methods*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **13** No. 5 (1992), 1236-1264.

[4] HOCHBRUCK M., LUBICH C., *On Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator*, SIAM J. Numer. Anal., **34**, No. 5 (1997), 1911-1925.

[5] SMIRNOV V. I., LEBEDEV N. A., *Functions of a complex variable. Constructive theory.* Translated by Scripta Technica Ltd. London: Iliffe Books Ltd. (1968).

Dipartimento di Scienze Matematiche, Università di Trieste
e-mail: novati@univ.trieste.it
Dottorato in Matematica Computazionale (sede amministrativa: Padova) - Ciclo XIII
Direttore di ricerca: Prof. Igor Moret, Università di Trieste