La Matematica nella Società e nella Cultura

Rivista dell'Unione Matematica Italiana

Marina Popolizio

Tecniche di accelerazione per approssimare l'esponenziale di matrice

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Serie 1, Vol. **2** (2009), n.2 (Fascicolo Tesi di Dottorato), p. 275–278.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=RIUMI_2009_1_2_2_275_0>

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2009.

La Matematica nella Società e nella Cultura
Rivista dell'Unione Matematica Italiana
Serie I, Vol. II, Agosto 2009, 275-278

Tecniche di accelerazione per approssimare l'esponenziale di matrice

MARINA POPOLIZIO

Questo lavoro di tesi ha riguardato l'analisi di tecniche di accelerazione per l'approssimazione dell'azione dell'esponenziale di matrice su un vettore.

Data una matrice quadrata A e un vettore v il problema dell'approssimazione numerica di

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

è infatti un importante argomento dell'analisi numerica ed è stato ampiamente studiato a partire dagli anni '60.

L'interesse suscitato da questo problema è principalmente motivato dall'importante ruolo rivestito dal vettore y in (1) in numerose applicazioni. Questo aspetto giustifica la vasta letteratura dedicata a questo argomento e la varietà di contributi da parte di ricercatori di aree molto diverse tra cui la fisica, l'ingegneria e la chimica.

Una delle applicazioni più importanti in cui è richiesto il calcolo di (1) è la risoluzione di equazioni differenziali ordinarie o di equazioni alle derivate parziali. Consideriamo ad esempio l'equazione

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u(x,t)}{\partial t} = Lu(x,t) & x \in \Omega \\ u(x,0) = u_0, & x \in \Omega \\ u(x,t) = \sigma(x), & x \in \partial\Omega,\ t > 0, \end{cases} \tag{2}$$

con L operatore differenziale del secondo ordine di tipo ellittico e Ω insieme aperto, connesso e limitato.

Discretizzando (2) rispetto alle variabili spaziali il problema si riduce all'equazione differenziale ordinaria

$$\frac{dw(t)}{dt} = Aw(t), \quad w(0) = w_0,$$

la cui soluzione è

$$w(t) = \exp(tA)w_0,$$

esattamente come in (1).

Ci sono tantissime altre situazioni che richiedono il calcolo di (1): nella descrizione di sistemi dinamici, nelle applicazioni della spettroscopia nucleare, in teoria del controllo, nell'analisi delle catene di Markov ecc.

Come anticipato, la matrice A spesso è il risultato di una discretizzazione o deriva da modelli di problemi reali: per questi motivi essa è generalmente di grandi dimensioni. Tuttavia spesso risulta piuttosto sparsa e di frequente è simmetrica e (semi)definita negativa, come si è assunto in questa tesi. Queste caratteristiche rendono necessaria l'applicazione di metodi numerici efficienti, sia per quanto riguarda i costi computazionali che per l'occupazione di memoria.

Questo motiva, inoltre, l'uso di tecniche di accelerazione ed esse hanno rappresentato l'argomento su cui si è concentrata l'analisi della tesi.

Tra i metodi più applicati per il calcolo di funzioni di matrici di grandi dimensioni spiccano i metodi di tipo proiettivo: il principio alla base di tali tecniche è proiettare il problema in spazi di dimensione più piccola rispetto al problema di partenza, risolvere il problema proiettato, in generale più semplice di quello di partenza, e poi risalire alla soluzione del problema dato prolungando quella calcolata.

I *metodi dei sottospazi di Krylov* sono alcuni dei metodi di tipo proiettivo più noti. Essi sono stati usati a partire dagli anni '90 nelle applicazioni della chimica e della fisica e solo in un secondo momento ci si è occupati dello studio delle proprietà teoriche, tra cui l'analisi della convergenza.

La tecnica consiste nel costruire una approssimazione di $\exp(A)v$ nello spazio

$$\mathcal{K}_m(A, v) = \operatorname{span}\{v, Av, \dots, A^{m-1}v\}.$$

Per costruire questo spazio si parte da $v_1 = v/\|v\|$ e ad ogni passo $i = 2, \dots,$ si aggiunge il vettore v_i ottenuto applicando il processo di ortonormalizzazione di Gram-Schmidt a Av_{i-1} rispetto ai vettori precedentemente calcolati. Con questa procedura si ottengono allora la matrice $V_m = [v_1, \dots, v_m]$ e la matrice H_m di dimensione $m \times m$ i cui elementi sono i coefficienti del processo di ortonormalizzazione. Mediante queste matrici è possibile ottenere un'approssimazione di (1) come

$$\exp(A)v \approx \|v\| V_m \exp(H_m) e_1$$

essendo e_1 la prima colonna della matrice identità di dimensione $m \times m$.

Uno dei punti di forza di queste tecniche è che solitamente una dimensione m piccola permette di raggiungere un'ottima approssimazione della soluzione e dunque per il calcolo di $\exp(H_m)$ si può scegliere tra diversi metodi classici.

Sfortunatamente, come mostrato da Hochbruck e Lubich [3], la convergenza dei metodi dei sottospazi di Krylov dipende dalla norma della matrice A ed in generale la convergenza inizia per m prossimo a $\sqrt{\|A\|}$. Questo rende l'approccio particolarmente lento per problemi in cui la matrice A abbia uno spettro molto grande, come molto spesso accade per le matrici derivanti da discretizzazioni di alcuni operatori differenziali. La lentezza di questi approcci ha determinato l'individuazione di tecniche di accelerazione. Una di queste è la tecnica dello *Shift-and-Invert* proposta da Moret e Novati [4] e indipendentemente da van den Eshof e Hochbruck [7]. Questa tecnica si basa sui sottospazi di Krylov $K_m((I - \sigma A)^{-1}, v)$ per un opportuno parametro di shift σ e numerose applicazioni mostrano la superiorità di questo approccio rispetto ai metodi di Krylov standard. Si nota infatti che per ottenere una accuratezza fissata è sufficiente uno spazio di dimensione molto più piccola rispetto a quella richiesta dai metodi di Krylov classici.

L'analisi della tesi ha riguardato uno studio teorico sulla scelta del parametro di shift ottimale. Si è ottenuto l'interessante risultato di poter fissare questo parametro *a priori*, indipendentemente dalle caratteristiche della matrice A.

Tale scelta è stata possibile inquadrando il metodo *Shift-and-Invert* nell'ottica delle approssimazioni razionali dell'operatore esponenziale. Il vettore $\exp(A)v$, infatti, si può anche approssimare mediante il vettore $\mathcal{R}(A)v$ se $\mathcal{R}$ è una approssimazione razionale dell'esponenziale. In particolare, se supponiamo che il numeratore e il denominatore di $\mathcal{R}$ siano polinomi di grado ν e che i poli $\xi_1, \ldots, \xi_\nu$ di $\mathcal{R}$ siano semplici allora, indicati con $\tau_0, \ldots, \tau_\nu$ i residui, si ha che

$$\mathcal{R}(A)v = \tau_0 v + \sum_{j=1}^{\nu} \tau_j (A - \xi_j I)^{-1} v. \tag{3}$$

Uno dei risultati della tesi è aver mostrato come la tecnica dello *Shift-and-Invert* corrisponda a precondizionare opportunamente i sistemi in (3).

Nella tesi abbiamo inoltre considerato la tecnica presentata da Axelsson e Kucherov [1] per risolvere sistemi complessi usando solo aritmetica reale: un importante risultato raggiunto è aver dimostrato come essa equivalga ad un particolare precondizionamento dei sistemi in (3).

Gran parte delle tesi è stata dedicata al confronto tra varie tecniche di accelerazione per il calcolo di $\exp(A)v$. Confronti di questo tipo erano completamente assenti in letteratura, il che rendeva praticamente impossibile stabilire l'effettiva bontà dei metodi. I risultati hanno mostrato la loro efficienza, sottolineando le differenze degli approcci al variare dei problemi e delle loro dimensioni.

Tra i vari metodi confrontati abbiamo considerato il metodo *Extended Krylov* proposto da Druskin e Knizhnerman [2] e implementato in modo efficiente da Simoncini [6] in cui si considera

$$\mathcal{K}_{k,m}(A, v) = \operatorname{span}\{A^{-k+1}v, \ldots, A^{-1}v, v, Av, \ldots, A^{m-1}v\}.$$

L'ultima parte della tesi è stata dedicata all'integrazione di una equazione differenziale ordinaria del tipo

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= Au, \quad 0 \le t \le T \\ u(0) &= u_0, \end{aligned} \tag{4}$$

mediante la tecnica classica di *Crank-Nicolson* e la tecnica *ideal one-step* combinata con le tecniche di accelerazione analizzate nella tesi. In pratica abbiamo fissato un passo temporale δt e abbiamo determinato i vettori $w_0 = u_0, w_1, \ldots, w_N$ tali che $w_N = u(T)$.

Per l'*ideal one-step method* la successione di w_i è definita dalla relazione

$$w_{i+1} = \exp(\delta t\, A) w_i,$$

mentre per il metodo di *Crank-Nicolson*

$$\left(I - \frac{\delta t}{2} A\right) w_{i+1} = \left(I + \frac{\delta t}{2} A\right) w_i.$$

Abbiamo considerato il caso in cui $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ derivi dalla discretizzazione spaziale dell'operatore

$$\mathcal{L}(u) = (a(x,y)u_x)_x + b(x)u_{yy}, \qquad a(x,y) = 1 + y - x, \quad b(x) = 1 + x + x^2$$

con x e y in $[0,1]$, condizioni omogenee di Dirichlet per $x = 0$,1 e condizioni omogenee di Neumann per $y = 0, 1$. La condizione iniziale è invece stata scelta in modo che $u_0 = (1,\dots,1)/\sqrt{n}$.

Per i test le dimensioni $n = 2500, 8100, 14400$ sono state considerate.

Gli esperimenti condotti hanno evidenziato in modo netto la superiorità delle tecniche di accelerazione studiate nella tesi rispetto al metodo di *Crank-Nicolson* comunemente usato per problemi di questo tipo. Il risultato più sorprendente degli esperimenti numerici è che approssimando direttamente $\exp(TA)u_0$ con *Shift-and-Invert* o usando (3) con opportune tecniche per la risoluzione dei sistemi lineari coinvolti si ottiene un'elevata accuratezza e tempi di calcolo nettamente inferiori a quelli richiesti da *Crank-Nicolson* per raggiungere la stessa accuratezza. Questi risultati mostrano come il calcolo efficiente di vettori della forma (1) possa semplificare la risoluzione di problemi comuni in applicazioni in cui la soluzione analitica sia nota a priori.

La maggior parte dei risultati presentati nella tesi sono stati pubblicati in [5], scritto in collaborazione con la prof.ssa Valeria Simoncini.

BIBLIOGRAFIA

[1] AXELSSON O. e KUCHEROV A., *Real valued iterative methods for solving complex symmetric linear systems*, Numer. Linear Algebra Appl., **7** (2000), 197-218.

[2] DRUSKIN V. e KNIZHNERMAN L., *Extended Krylov subspaces: approximation of the matrix square root and related functions*, SIAM J. Matrix Analysis and Applications, **19** (1998), 755-771.

[3] HOCHBRUCK M. e LUBICH C., *On Krylov subspace approximations to the matrix exponential operator*, SIAM Journal on Numerical Analysis, **34** (1987), 1911-1925.

[4] MORET I. e NOVATI P., *RD-Rational Approximations of the Matrix Exponential*, BIT, Numerical Mathematics, **44** (2004), 595-615.

[5] POPOLIZIO M. e SIMONCINI V., *Acceleration Techniques for Approximating the Matrix Exponential Operator*, SIAM J. Matrix Analysis and Appl., **30** (2008), 657-683.

[6] SIMONCINI V., *A new iterative method for solving large-scale Lyapunov matrix equations*, SIAM Journal on Scientific Computing, **29** (2007), 1268-1288.

[7] VAN DEN ESHOF J. e HOCHBRUCK M., *Preconditioning Lanczos approximations to the matrix exponential*, SIAM Journal on Scientific Computing, **27** (2006), 1438-1457.

Dipartimento di Matematica, Università di Bari
e-mail: popolizio@dm.uniba.it
Dottorato in Matematica
con sede presso l'Università di Bari – Ciclo XIX
Direttore di ricerca: prof.ssa Valeria Simoncini, Università di Bologna