Una equazione matriciale che interviene in nano tecnologia

Beatrice Meini

Due giorni di ALN, Genova, Febbraio 16–17, 2012

Università di Pisa

Outline

Proprietà teoriche

Metodi numerici

Qualche esperimento

Nuove idee

Il problema [Guo-Kuo-Lin 2011]

Date $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $B = B^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$, risolvere

$$X + A^T X^{-1} A = -B + \mathcal{E} I + i\eta I,$$

con $\eta > 0$ piccolo e $\mathcal{E} \in \mathbb{R}$.

- La soluzione cercata è la $X(\mathcal{E},\eta)$ tale che $\rho(X(\mathcal{E},\eta)^{-1}A) < 1$.
- Nelle applicazioni interessa $X(\mathcal{E}) = \lim_{\eta\to 0^+} X(\mathcal{E},\eta)$, per molti valori di $\mathcal{E}$.

Proprietà teoriche

- La soluzione cercata $X(\mathcal{E},\eta)$ è simmetrica e complessa.
- I valori d'interesse fisico di $\mathcal{E}$ sono quelli per cui $X(\mathcal{E}) = \lim_{\eta\to 0^+} X(\mathcal{E},\eta)$ non è reale.
- I valori d'interesse fisico di $\mathcal{E}$ sono quelli per cui il polinomio matriciale $A - z(\mathcal{E}I - B) - z^2A^T$ ha autovalori di modulo 1, e questi non sono reali; in particolare $\rho(X(\mathcal{E})^{-1}A) = 1$.

Iterazione funzionale [Guo-Kuo-Lin 2011]

Sia $Q_{\mathcal{E},\eta} = -B + \mathcal{E}I + i\eta I$.
Genera la successione

$$X_{k+1} = Q_{\mathcal{E},\eta} - A^T X_k^{-1} A, \quad k \geq 0.$$

Se X_0 è complessa simmetrica tale che $\mathrm{Im}(X_0) > 0$, allora $X_k \to X(\mathcal{E},\eta)$, linearmente se $\eta > 0$.

Inconveniente: la convergenza può essere estremamente lenta se $\rho(X(\mathcal{E},\eta)^{-1}A) \approx 1$.

(Parziale) rimedio: iterazione funzionale modificata

$$X_{k+1} = (1-c)X_k + c(Q_{\mathcal{E},\eta} - A^T X_k^{-1} A), \quad k \geq 0,$$

con $0 < c < 1$.

Metodo di Newton [Guo-Kuo-Lin 2011]

Sia $Q_{\mathcal{E},\eta} = -B + \mathcal{E}I + i\eta I$.
Il metodo di Newton genera la successione

$$X_{k+1} - L_k^T X_{k+1} L_k = Q_{\mathcal{E},\eta} - 2L_k^T A, \quad k \geq 0,$$

dove $L_k = X_k^{-1} A$.

Inconveniente: la convergenza è garantita solo se X_0 è complessa, simmetrica e abbastanza vicina a $X(\mathcal{E}, \eta)$.
Vantaggio: è self-correcting, e se i valori di $\mathcal{E}$ non sono molto lontani tra loro, $X(\mathcal{E}_1, \eta)$ può essere preso come punto iniziale per il calcolo di $X(\mathcal{E}_2, \eta)$.

Structured-doubling algorithm [Guo-Kuo-Lin 2011]

Genera la successione

$$M_k \begin{bmatrix} I \\ X \end{bmatrix} = L_k \begin{bmatrix} I \\ X \end{bmatrix} (X^{-1}A)^{2^k}$$

dove

$$M_k = \begin{bmatrix} A_k & 0 \\ Q_k & -I \end{bmatrix}, \quad L_k = \begin{bmatrix} -P_k & I \\ A_k^T & 0 \end{bmatrix}.$$

Se $\eta > 0$, $Q_k \to X(\mathcal{E}, \eta)$ quadraticamente.

Inconvenienti: se $\eta \approx 0$ la convergenza è più lenta, e peggiora l'accuratezza dei risultati; inoltre, per ogni valore di $\mathcal{E}$ occorre applicare nuovamente l'algoritmo.
Se $\eta = 0$ l'algoritmo non converge per i valori di interesse di $\mathcal{E}$.

Structured algorithm [Guo-Kuo-Lin 2012]

La soluzione è calcolata approssimando il sottospazio invariante c-stabile del pencil

$$\begin{bmatrix} Q_{\mathcal{E},\eta} & A - A^T \\ A^T - A & Q_{\mathcal{E},\eta} \end{bmatrix} - z \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & A^T \end{bmatrix} := K - zN.$$

Il sottospazio invariante viene calcolato:

- riducendo il pencil $K - zN$ in forma triangolare a blocchi

$$\begin{bmatrix} K_1 & K_2 \\ 0 & K_1^T \end{bmatrix} - z \begin{bmatrix} N_1 & N_2 \\ 0 & N_2^T \end{bmatrix}$$

  con K_1 in forma Hessenberg, N_1 triangolare, K_2 e N_2 antisimmetriche;
- applicando l'algoritmo QZ al pencil $K_1 - zN_1$.

Structured algorithm [Guo-Kuo-Lin 2012]

Vantaggio: generale accuratezza dei risultati, anche quando $\eta \approx 0$, e possibilità di trattare direttamente il caso $\eta = 0$.

Inconvenienti: per ogni valore di $\mathcal{E}$ occorre applicare nuovamente l'algoritmo; nella fase finale dell'algoritmo occorre invertire una matrice, che potrebbe essere mal condizionata.

Come varia $X(\mathcal{E}, \eta)$, come funzione di η?

- Sia $\Delta \in \mathbb{R}$ tale che, per $\mathcal{E} \in \Delta$, $X(\mathcal{E}) = \lim_{\eta \to 0^+} X(\mathcal{E}, \eta)$ non è reale.
  Per tali valori di $\mathcal{E}$ il polinomio matriciale $P(z) = A - z(\mathcal{E}I - B) - z^2 A^T$ ha autovalori di modulo 1, e questi non sono reali.
- Fissiamo $\eta > 0$ piccolo.
- Discretizziamo Δ suddividendolo in intervalli di ampiezza h.
- Calcoliamo $X(\mathcal{E}, \eta)$ e tracciamo il grafico di $\|X(\mathcal{E} + h, \eta) - X(\mathcal{E}, \eta)\|$, con $\mathcal{E} \in \Delta$.

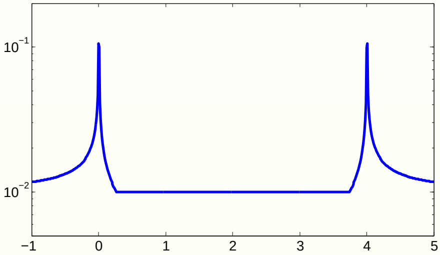
Esempio 1

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} t+1 & t \\ t & t+1 \end{bmatrix}, \quad t \geq 0.$$

Se $t < 1$, $\Delta = [0, 2t] \cup [2, 2(t+1)]$.
Se $t \geq 1$, $\Delta = [0, 2] \cup [2t, 2(t+1)]$.

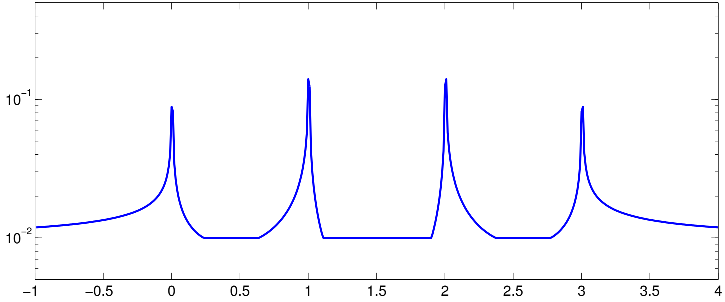
Esempio 1

$$t = 1, \Delta = [0, 4]$$



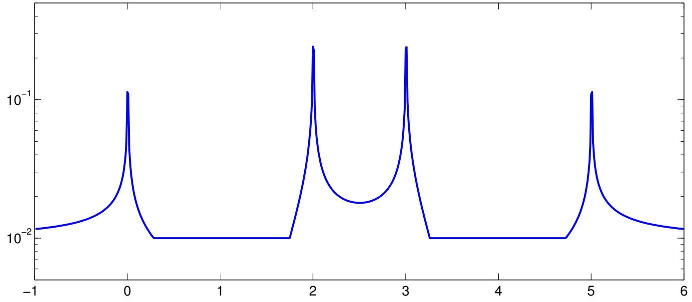
Esempio 1

$t = 0.5, \Delta = [0, 1] \cup [2, 3]$



Esempio 1

$t = 1.5, \Delta = [0,2] \cup [3,5]$



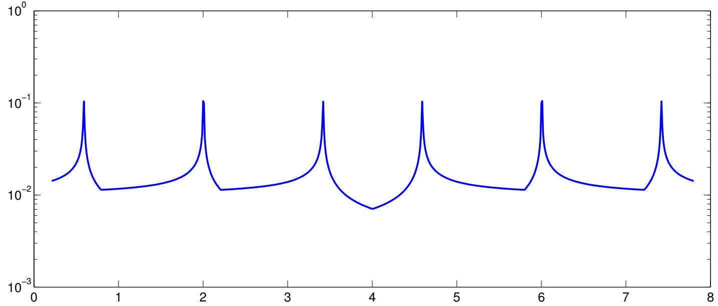
Esempio 2

$$A = -I, \quad B = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

Se $\mathcal{E} \in \Delta = [0.5858, 7.4142]$, il polinomio $P(z)$ ha radici non reali di modulo 1, ma:

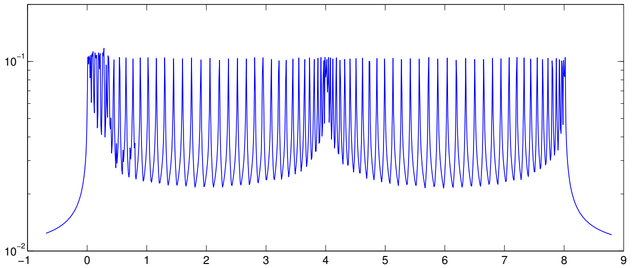
- se $\mathcal{E} \in [0.585, 2) \cup (6, 7.4142]$, $P(z)$ ha 2 autovalori di modulo 1
- se $\mathcal{E} \in [2, 3.4142] \cup [4.5858, 6]$, $P(z)$ ha 4 autovalori di modulo 1
- se $\mathcal{E} \in [3.4143, 4.5857]$, $P(z)$ ha 6 autovalori di modulo 1

Esempio 2

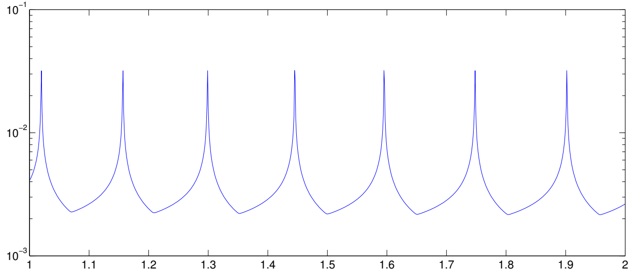


Esempio 3

Equazione che interviene nelle applicazioni.
Coefficienti di dimensione 89×89, $\Delta = [0, 8]$

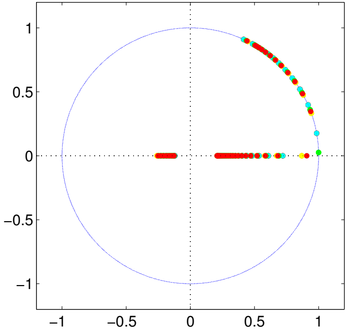


Esempio 3



Esempio 3

Autovalori di $X(\mathcal{E},\eta)^{-1}A$, per $\eta = 10^{-8}$, $\mathcal{E} = 1, 1.01, 1.02, 1.03$



Espansione in serie di Taylor

Fissato η, se $\mathcal{E}_1$ e $\mathcal{E}_0$ appartengono allo stesso "intervallo buono",

$$X(\mathcal{E}_1) \approx X(\mathcal{E}_0) + (\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_0)X'(\mathcal{E}_0) + \frac{(\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_0)^2}{2} X''(\mathcal{E}_0)$$

- $X'(\mathcal{E})$ risolve l'equazione

$$Y - (A^T X(\mathcal{E})^{-1}) Y (X(\mathcal{E})^{-1} A) = I$$

- $X''(\mathcal{E})$ risolve l'equazione

$$Y - (A^T X(\mathcal{E})^{-1}) Y (X(\mathcal{E})^{-1} A) = \\ -2A^T X(\mathcal{E})^{-1} X'(\mathcal{E}) X(\mathcal{E})^{-1} X'(\mathcal{E}) X(\mathcal{E})^{-1} A$$

Altre idee

1. Per ciascun $\mathcal{E}$ nell'"intervallo buono" calcolare $X(\mathcal{E})$ usando la formula di Cauchy

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{f(s)}{s-z} ds$$

approssimando l'integrale utilizzando $X(\mathcal{E}_i)$, calcolato in opportuni $\mathcal{E}_i$.

Altre idee

1. Per ciascun $\mathcal{E}$ nell'"intervallo buono" calcolare $X(\mathcal{E})$ usando la formula di Cauchy

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{f(s)}{s - z} ds$$

   approssimando l'integrale utilizzando $X(\mathcal{E}_i)$, calcolato in opportuni $\mathcal{E}_i$.

2. Varianti di SDA? Se $\eta = 0$, SDA non converge per i valori $\mathcal{E}$ di interesse, per la presenza di zeri non reali e di modulo 1 del polinomio $P(z)$. È possibile "manipolare" gli zeri per ripristinare la convergenza?

Altre idee

1. Per ciascun $\mathcal{E}$ nell' "intervallo buono" calcolare $X(\mathcal{E})$ usando la formula di Cauchy

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{f(s)}{s - z} ds$$

   approssimando l'integrale utilizzando $X(\mathcal{E}_i)$, calcolato in opportuni $\mathcal{E}_i$.
2. Varianti di SDA? Se $\eta = 0$, SDA non converge per i valori $\mathcal{E}$ di interesse, per la presenza di zeri non reali e di modulo 1 del polinomio $P(z)$. È possibile "manipolare" gli zeri per ripristinare la convergenza?
3. Il metodo di Newton è proprio da buttare? Come possiamo scegliere una approssimazione iniziale che garantisca la convergenza alla soluzione cercata?