

„Weniger ist mehr.“

Eigenwertfilterung am Beispiel hermitescher
Eigenwertprobleme

Thorsten Matthias Lucke

Betreuer: Prof. Jrg Liesen, Prof. Christian Mehl

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science

Department Name
Technische Universitt Berlin

24. Juli 2017

Dedicatio

Meiner Familie, der Thesisselbsthilfegruppe und dem 1 Caf

Declaratio

Hiermit erkläre ich, dass ich alles von Wikipedia abgeschrieben habe, so wie sich das gehört für eine großartige Arbeit.

Recognitio

Danke an

- Thesis Selbsthilfegruppe
- Prof. Liesen, Prof. Mehl
- Chopin, dessen Musik mich durch die Frustphasen der Arbeit geführt hat

Inhaltsverzeichnis

1	Präludium	6
1.1	Grundlagen	7
2	Filtertechniken	8
2.1	Rayleigh-Ritz-Verfahren / Galerkin	8
2.2	Konturintegration	13
2.3	Illustration	15
3	Beschleunigung durch rationale Funktionen	18
3.1	Beschleunigtes Rayleigh-Ritz Verfahren	18
3.2	Rationale Funktionen	19
3.3	Approximation des Spektralprojektors	19
3.4	Der FEAST-Algorithmus	21
A	yolo	22

Kapitel 1

Präludium

Das Lösen von Eigenwertproblemen ist eine Standarddisziplin in der numerischen linearen Algebra. Gleichungen der Gestalt

$$Ax = \lambda Bx \tag{1.1}$$

begegnet man in ganz unterschiedlichen Kontexten. So sind sie beispielsweise bei der Bestimmung von Eigenfrequenzen oder dem Ermitteln von Fixpunkten beim Rotieren eines Fußballs¹ ebenso wie beim Untersuchen des PageRanks einer Website von Bedeutung. Entsprechend strotzt der Kanon von angebotenen numerischen Lösungsmethoden von Vielfalt und Virtuosität.

Nun mag der Fall eintreten, da es notwendig wird, lediglich eine Teilmenge aus der Menge aller Eigenpaare zu untersuchen.

Geeignetes Beispiel finden.

Wie soll nun aber der eifrige Numeriker die gewünschte Menge an Eigenpaaren finden?

Man könnte zunächst versuchen sämtliche Eigenpaare zu berechnen, die das Problem hergibt und händisch die gewünschte Teilmenge auswählen. Bei einem Problem dieser Größenordnung dürfte der Rechenknecht allerdings eine ordentliche Weile beschäftigt sein und das Leben ist fröhlich zu knapp, um auf das Terminieren von Algorithmen zu warten.

¹Hier wird auf den bekannten *Satz vom Fußball* angespielt. Dieser besagt, dass auf einem Fußball zwei Punkte existieren, die zu Spielbeginn und zur Halbzeit an der gleichen Stelle liegen – informell formuliert.

1.1 Grundlagen

gauss-legendre quadratur, spektral projektoren (später?), rationale funktionen, spektralzerlegung für allg eigenwertproblem

Um das Lesen dieser Arbeit mehr zu einer Freude denn zu einer Schikane zu machen, soll dieser Abschnitt einige Grundlagen der linearen Algebra und der Funktionentheorie bereitstellen. Obschon sich der Autor bemüht hat, in der Literatur gängige Notation zu benutzen, bittet er den verständnisvollen Leser bei Unklarheiten im Anhang „Notationen“ nachzuschlagen.

Den Anfang machen Definitionen und Resultaten aus der Matrizen­theorie. Eine Matrix $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ wird als *hermitesch* bezeichnet, falls sie die Identität $A = A^H$ erfüllt. Sie ist *positiv definit*, sofern für alle Vektoren $x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ die Abschätzung

$$x^H A x > 0$$

gilt. Folglich werden wir eine Matrix *hermitesch positiv definit* (HPD) nennen, wenn sie sowohl hermitesch als auch positiv definit ist.

Ist $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ eine solche HPD-Matrix und sind $x, y \in \mathbb{C}^n$, so werden wir anstelle von $x^H A y$ die Notation $\langle x, y \rangle_A$ verwenden. Im Falle $A = I_n$ schreiben wir kurz $\langle x, y \rangle$.

ne anders: $\langle x, y \rangle = y^H x$ oder doch nicht anders? einfach einträge tauschen oder so
Im Rahmen dieser Arbeit werden überwiegend Hermitesche Eigenwertprobleme betrachtet.

Proposition 1.1. Ist p eine Projektion auf den Unterraum U , dann gilt $p(u) = u$ für alle $u \in U$.

Beweis. Sei zunächst $u \in \text{Bild } p$. Dann existiert $v \in V$ mit $p(v) = u$. Nach Definition gilt aber auch $p^2(v) = u = p(u) = u$. Also folgt $p(u) = u$. gilt $\text{Bild}(p) = U$? \square

Bilinearität von $\langle \cdot, \cdot \rangle_A$ Kontur (komplex), Jordankurven, Invarianter Unterraum, Matrixpolynom

Kapitel 2

Filtertechniken

Dieses Kapitel widmet sich der Frage, ob und wie man aus der Menge aller Eigenpaare des Problems

$$Ax = \lambda Bx$$

eine gewünschte Teilmenge auswählen kann. Dazu werden im Rahmen dieser Arbeit aus dem Katalog der Verfahren die zwei Folgenden ausgewählt und vorgestellt: das Rayleigh-Ritz-Verfahren / Galerkin-Methoden¹ und Konturintegration.

Ob ein Zusammenhang zwischen beiden Konzepten besteht, wird im nächsten Kapitel geklärt.

2.1 Rayleigh-Ritz-Verfahren / Galerkin

Eine **Die?** Idee dieser Klasse von Verfahren ist das Approximieren des von den gesuchten Eigenvektoren aufgespannten Unterraums. Bevor wir das allgemeine Eigenwertproblem untersuchen, wenden wir unsere Aufmerksamkeit dem gewöhnlichen Eigenwertproblem

$$Ax = \lambda x$$

zu und betrachten für eine Zahl $m \in \mathbb{N}$ mit $m \leq n$ einen m -dimensionalen Unterraum $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}^n$. Dieser zunächst nicht näher bestimmte *Suchraum* wird als Grundlage für das Verfahren gewählt. Gesucht sind nun Paare $(\tilde{\lambda}, \tilde{x}) \in \mathbb{C} \times \mathcal{U}_m \setminus \{0\}$ – die wir als approximierte Lösungen des Eigenproblems verstehen wollen – welche die Eigenschaft

$$\langle u, A\tilde{x} - \tilde{\lambda}\tilde{x} \rangle = 0 \tag{2.1}$$

für alle $u \in \mathcal{U}_m$ erfüllen. Das Residuum $A\tilde{x} - \tilde{\lambda}\tilde{x}$ soll also orthogonal auf dem Suchraum stehen. Paare, die diesem Anliegen nachkommen, werden auch *Ritz-Paare*

¹Galerkin und Rayleigh ritz literatur blabla

bezüglich des Suchraums \mathcal{U}_m genannt.

Wir wollen nun annehmen, dass mit der Menge von Vektoren $\{u_i\}_{i=1:m} \subseteq \mathbb{C}^n$ eine Orthonormalbasis des Unterraums \mathcal{U}_m gegeben ist. Definieren wir dann die Matrix $U_m := [u_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$, so muss wegen $\tilde{x} \in \mathcal{U}_m$ ein Vektor $y \in \mathbb{C}^m$ existieren, mit $U_m y = \tilde{x}$. Die Forderung (2.1) ist dann zu der Gleichung

$$U_m^H (AU_m y - \tilde{\lambda} U_m y) = 0$$

äquivalent. Als direkte Konsequenz dieser Umformulierung erhalten wir unter Ausnutzung der Orthogonalität der Spalten von U_m mit

$$(U_m^H A U_m) y = \tilde{\lambda} y \tag{2.2}$$

ein neues Eigenwertproblem. Jedes Eigenpaar $(\tilde{\lambda}, y)$ von (2.2) liefert dann nach Konstruktion mit $(\tilde{\lambda}, U_m y)$ ein Ritz-Paar des gewöhnlichen Eigenwertproblems bezüglich des Suchraums \mathcal{U}_m . In Abhängigkeit von der Wahl des Suchraumes variiert natürlich Güte der Approximation. Ist etwa \mathcal{U}_m durch Eigenvektoren aufgespannt, so ist jedes Ritz-Paar schon ein Eigenpaar. Wir werden später aus den Untersuchungen des allgemeinen Eigenwertproblems folgern, dass bereits im Falle der Invarianz von \mathcal{U}_m unter A jedes Ritz-Paar von A bereits ein Eigenpaar ist. An dieser Stelle begnügen wir uns vorerst mit dieser erfreulichen Botschaft.

Zusammengefasst ergibt sich mit den obigen Überlegungen für die Berechnung von Ritz-Paaren folgender Algorithmus (XXX):

- berechne ONB $\{u_i\}_{i=1:m}$ von \mathcal{U}_m , setze $U_m := [u_i]_{i=1:m}$
- setze $\tilde{A} := U_m^H A U_m$ und löse $\tilde{A} y_i = \lambda_i y_i$, $y_i \in \mathbb{C}^m$, $i = 1 : m$
- $x_i := U_m y_i$
- gib Ritz-Paare (λ_i, x_i) aus

Die Idee dieser Methode ist also simpel: Transformiere das Eigenwertproblem mit einer gewissen Matrix in ein anderes Eigenwertproblem und benutze dessen Lösungen, um Ritz-Paare des ursprünglichen Problems zu erhalten. Doch wozu die Mühe, das ursprüngliche Eigenwertproblem in ein anderes Eigenwertproblem zu überführen? Zwar gelingt es, aus dem transformierten Problem (2.2) Ritz-Paare zu extrahieren, aber wäre nicht auch denkbar, sämtliche Eigenpaare von A zu approximieren und die zum Unterraum \mathcal{U}_m korrespondierende Teilmenge direkt auszuwählen?

Dies mag in Einzelfällen in der Tat sinnvoller sein. Sprechen wir allerdings von Matrixdimensionen jenseits der Vorstellungskraft, ist eine vollständige Berechnung aller Eigenpaare mitunter ein sehr zeitintensives Vergnügen. Bei genauerer Betrachtung der Gleichung (2.2) fällt auf, dass die Matrix $(U_m^H A U_m) \in \mathbb{C}^{m,m}$ im Falle $n \gg m$ ein mitunter deutlich kleineres Format hat, als die Matrix A im ursprünglichen Problem. Man darf hier also erwarten, dass die benötigte Laufzeit zur Bestimmung der Ritz-Paare mit dem Algorithmus (XXX) geringer ist, als beim Approximieren sämtlicher Eigenpaare von A . Dies wird im vierten Kapitel anhand ausgewählter Beispiele illustriert.

Wir gehen nun einen Schritt weiter und erweitern die obige Theorie auf das verallgemeinerte Eigenwertproblem

$$Ax = \lambda Bx. \quad (2.3)$$

Dabei gehen wir ganz analog zum gewöhnlichen Eigenwertproblem vor. Es sei daher wieder $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}^n$ ein m -dimensionaler Suchraum. Gefunden werden sollen nun Paare $(\tilde{\lambda}, \tilde{x}) \in \mathbb{C} \times \mathcal{U}_m \setminus \{0\}$ die der Orthogonalitätsbedingung

$$A\tilde{x} - \tilde{\lambda}B\tilde{x} \perp \mathcal{U}_m \quad (2.4)$$

genügen. Wieder substituieren wir $U_m y = \tilde{x}$ und erhalten die zu (2.4) äquivalente Forderung

$$U_m^H (AU_m y - \tilde{\lambda}BU_m y) = 0.$$

Schließlich lösen wir das transformierte Eigenwertproblem

$$(U_m^H A U_m)y = \tilde{\lambda}(U_m^H B U_m)y. \quad (2.5)$$

Wie bereits beim gewöhnlichen Eigenwertproblem kann aus jeder Lösung $(\tilde{\lambda}, y)$ von (2.5) mit $(\tilde{\lambda}, U_m y)$ ein Ritz-Paar für das verallgemeinerte Eigenwertproblem gewonnen werden.

Mit dieser Konstruktion lässt sich der Algorithmus (XXX) wie folgt abwandeln:

- berechne ONB $\{u_i\}_{i=1:m}$ von \mathcal{U}_m , setze $U_m := [u_i]_{i=1:m}$
- setze $\tilde{A} := U_m^H A U_m$, $\tilde{B} := U_m^H B U_m$ und löse $\tilde{A}y_i = \lambda_i \tilde{B}y_i$, $y_i \in \mathbb{C}^n, i = 1 : m$
- $x_i := U_m y_i$
- gib Ritz-Paare (λ_i, x_i) aus

Nun, da die Idee der Verfahren vorgestellt wurde, wollen wir einige Beobachtungen festhalten. Eingangs wurde behauptet, dass die Invarianz des Suchraumes \mathcal{U}_m unter

A dazu führt, dass jedes Ritz-Paar bezüglich \mathcal{U}_m ein Eigenpaar von A ist. Doch warum ist das so? Dies zu beantworten verpflichtet sich der folgende Satz.

Satz 2.1. Neben zwei Matrizen $A, B \in \mathbb{C}^{n,n}$ – wobei B eine HPD-Matrix ist – sei für $m \in \mathbb{N}$ mit $m \leq n$ ein m -dimensionaler Unterraum $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}^n$ gegeben. Ist dieser invariant unter $B^{-1}A$, so ist jedes Ritzpaar von $B^{-1}A$ bezüglich \mathcal{U}_m auch ein verallgemeinertes Eigenpaar von A .

Beweis. Beginnen wir mit einer ONB $\{u_i\}_{i=1:m} \subseteq \mathcal{U}_m$ des Unterraums \mathcal{U}_m und setzen wie bisher $U_m := [u_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$. Aufgrund der Invarianz von \mathcal{U}_m unter $B^{-1}A$ muss eine Matrix $V_m \in \mathbb{C}^{m,m}$ existieren, welche die Gleichung

$$B^{-1}AU_m = U_mV_m \quad (2.6)$$

erfüllt. Insbesondere folgt unter Ausnutzung der Orthogonalität der Spalten von U_m die Identität $U_m^H B^{-1}AU_m = V_m$. Sind nun $\lambda \in \mathbb{C}$ und $y \in \mathbb{C}^m \setminus \{0\}$ so gewählt, dass (λ, U_my) ein Ritz-Paar von $B^{-1}A$ ist, so folgt aus

$$U_m^H B^{-1}AU_my = V_my$$

mit (2.6) die Gleichung

$$B^{-1}AU_my = U_mV_my = \lambda U_my$$

und schließlich auch die Behauptung durch Umstellen. \square

Da das gewöhnliche Eigenwertproblem ein Spezialfall des allgemeinen Eigenwertproblems ist, können wir aus dem eben bewiesenen Resultat unmittelbar das folgende Korollar ableiten.

Korollar 2.2. Ist $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ und $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}^n$ ein m -dimensionaler A -invarianter Unterraum, so ist jedes Ritz-Paar von A bezüglich \mathcal{U}_m ein Eigenpaar von A .

Beweis. Betrachte für $B := I_n$ das verallgemeinerte Eigenwertproblem

$$Ax = \lambda Bx = \lambda x.$$

Die Aussage folgt dann aus dem vorigen Satz. \square

Diese Erkenntnis ist vor allem aus algorithmischer Sicht höchst nützlich. Implementiert man das Rayleigh-Ritz-Verfahren für das gewöhnliche Eigenwertproblem iterativ (siehe Quelle blablabla), so kann der Iterationsprozess abgebrochen werden, sobald die Unterraumiterierte Bild($U_m^{(i)}$) invariant unter A ist.

Das Rayleigh-Ritz-Verfahren steht in einem engen Zusammenhang zu Projektionsverfahren. Mit einer geeigneten Projektionsmatrix $P \in \mathbb{C}^{n,n}$ ist ein Paar $(\lambda, x) \in \mathbb{C} \times \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ (oder $\in \mathbb{C} \times \mathcal{U}_m \setminus \{0\}$?) genau dann eine Lösung der Gleichung (2.3), wenn es eine Lösung von

$$P^H A P x = \lambda P^H B P x$$

ist. Richtig definiert, besitzt P noch weitere nützliche Eigenschaften, die der folgende Satz vorstellt.

Satz 2.3. Es sei $B \in \mathbb{C}^{n,n}$ eine HPD-Matrix und für $m \in \mathbb{N}$ mit $m \leq n$ sei ein m -dimensionaler Unterraum $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}^n$ gegeben. Sei weiter $\{u_i\}_{i=1:m} \subseteq \mathcal{U}_m$ eine Basis B -orthogonaler Vektoren, das heißt, die Matrix $U_m := [u_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$ erfülle die Gleichung $U_m^H B U_m = I_m$. Dann ist die von der Matrix $P := U_m U_m^H B \in \mathbb{C}^{n,n}$ induzierte lineare Abbildung

$$p: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n, x \mapsto U_m U_m^H B x$$

eine B -orthogonale Projektion auf den Unterraum \mathcal{U}_m . Außerdem gilt für alle $x \in \mathbb{C}^n$ die Identität

$$\|x - p(x)\|_B = \min_{y \in \mathcal{U}} \|x - y\|_B, x \in \mathbb{C}^n.$$

Beweis. Aus der B -Orthogonalität von U_m folgt für alle $x \in \mathbb{C}^n$

$$p^2(x) = U_m U_m^H B U_m U_m^H B x = U_m U_m^H B x = p(x)$$

und damit gilt die Mengengleichheit $p(\mathbb{C}^n) = \mathcal{U}$ nach Konstruktion. Ist nun $y \in \mathcal{U}$ und $x \in \mathbb{C}^n$, dann folgt wegen $p(y) = y$ und $B = B^H$ auch

$$\begin{aligned} \langle y, x - p(x) \rangle_B &= y^H (Bx - B U_m U_m^H B x) \\ &= y^H (Bx - B^H U_m U_m^H B x) \\ &= y^H B x - p(y)^H B x = 0. \end{aligned}$$

Es gilt demnach $x - p(x) \perp_B \mathcal{U}$. Die Optimierungsaufgabe wird wegen

$$\begin{aligned} \|x - y\|_B^2 &= \|x - p(x) + p(x) - y\|_B^2 \\ &= \|x - p(x)\|_B^2 + \|p(x) - y\|_B^2 \\ &\geq \|x - p(x)\|_B^2 \end{aligned}$$

gelöst, denn aufgrund der positiven Definitheit von Normen, gilt Gleichheit genau dann, wenn $p(x) = x$ erfüllt ist. \square

Mit Hilfe der im Satz eingeführten Matrix P , lässt sich die Gleichung (2.5) ele-

gant umformulieren. Durch Linksmultiplikation mit $B^H U_m$ und dem Einschub der Identität $U_m^H B U_m$ gilt nämlich

$$B^H U_m (U_m^H A U_m) (U_m^H B U_m) y = \lambda B^H U_m (U_m^H B U_m) (U_m^H B U_m) y$$

und folglich

$$P^H A P U_m y = \lambda P^H B P U_m y.$$

Wenn wir uns an dieser Stelle erinnern, dass x durch $U_m y$ ersetzt wurde, dann erhalten wir tatsächlich

$$P^H A P x = \lambda P^H B P x.$$

Im Fall der gewöhnlichen Eigenwertgleichung erhalten wir speziell

$$P A P x = \lambda x.$$

Es ist leider nicht ohne Weiteres möglich einen bestimmten Eigenraum gezielt zu approximieren, wenn keine weiteren Informationen bekannt sind. Gängige Wahl für Suchräume sind Krylow-Räume. Deren Struktur führt dazu, dass Unterräume approximiert werden, die von den Eigenvektoren mit den betragsmäßig größten Eigenwerten aufgespannt werden. Es obliegt daher dem persönlichen Geschick einen passenden Suchraum aufzustellen.

anstelle einer basis von U kann auch beliebige matrix Q gewählt werden und dann diese auf Um projiziert werden mit $U := U_m^H U_m B Q$ Dann ist man fertig, aber Projektor ist i.A.nicht bekannt, daher approximieren. siehe kapitel 3

2.2 Konturintegration

Die folgenden Zeilen präsentieren eine Vorgehensweise, die es gestattet den im vorigen Abschnitt eingeführten Spektralprojektor analytisch zu konstruieren. Wir werden zu einem späteren Zeitpunkt untersuchen, in wie weit die Numerik in der Lage ist, dieses Verfahren algorithmisch umzusetzen.

Im weiteren Verlauf seien $A, B \in \mathbb{C}^{n,n}$ hermitesche Matrizen und B zusätzlich positiv definit. Wir wollen annehmen, dass zwei Zahlen $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ vorgegeben sind, die das abgeschlossene Intervall $I := [\lambda_1, \lambda_2] \subseteq \mathbb{R}$ definieren. Wie bisher sollen Paare der Gestalt $(\lambda, x) \in I \times \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ ermittelt werden, welche der verallgemeinerten Eigenwertgleichung

$$Ax = \lambda Bx \tag{2.7}$$

genügen. Der Ausgangspunkt zur Bestimmung der gesuchten Eigenpaare² ist die durch

$$G: \Omega \rightarrow \mathbb{C}^{n,n}$$

$$\omega \mapsto (\omega B - A)^{-1}$$

definierte GREEN-Funktion, wobei $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ eine vom Spektrum von $B^{-1}A$ disjunkte Teilmenge der komplexen Zahlen ist. Diese Funktion G wird nun über eine geschlossene Jordan-Kurve γ , die um das vorgegebene Intervall I herumläuft, in der Gestalt

$$-\frac{1}{2\pi\iota} \int_{\gamma} G(\omega) \, d\omega$$

integriert.³ Hierbei ist die Integration eintragsweise zu verstehen.

Wir wollen nun annehmen, dass es genau $k \in \mathbb{N}$ Eigenwerte gibt, die im Inneren des Intervalls I liegen.⁴ Dann kann man nachweisen, dass sich das Integral durch eine Matrix $X_k = [x_i]_{i=1:k} \in \mathbb{C}^{n,k}$ in

$$-\frac{1}{2\pi\iota} \int_{\gamma} G(\omega) \, d\omega = X_k X_k^T$$

faktorisieren lässt, wobei x_i für jedes $i = 1 : k$ ein zu einem in I liegenden Eigenwert korrespondierender Eigenvektor ist. Überdies ist X_k eine B -orthogonale Matrix.⁵ Als direkte Konsequenz erhalten wir folglich mit dem Produkt

$$\left(-\frac{1}{2\pi\iota} \int_{\gamma} G(\omega) \, d\omega \right) \cdot B$$

den in Satz 2.3 eingeführten Spektralprojektor. Mit diesem Projektor können wir nun vorgehen wie im vorigen Kapitel und alle Eigenpaare des Problems finden. Bedauerlicherweise bleibt die Dimension des Problems unverändert. Daher begnügt man sich anstelle der Matrix B mit einer vollrangigen Matrix $\tilde{B} \in \mathbb{C}^{n,k}$ um das Ausgangsproblem auf die Dimension $(k \times k)$ zu reduzieren.

MEHR KOMPANA!

²Um der besseren Lesbarkeit Willen werden im Folgenden die verallgemeinerten Eigenvektoren und deren verallgemeinerte Eigenwerte kurz als Eigenvektor und Eigenwert bezeichnet.

³Mit ι ist im Folgenden stets die imaginäre Einheit bezeichnet, also $\iota = \sqrt{-1}$.

⁴Diese Forderung ist wohldefiniert, da der Eigenschaften von A und B wegen alle Eigenwerte von $B^{-1}A$ reell sind.

⁵Beweis wo?

2.3 Illustration

Bevor wir uns vom zweiten Kapitel verabschieden, sollen die Erkenntnisse der vorangegangenen Abschnitte an einem Beispiel vorgeführt werden. Dabei werden wir ausgehend von einem verallgemeinerten Eigenwertproblem gewisse Eigenwerte filtern und die Konturintegration mit der Ritz-Methode kombinieren.

Beispiel: einmal mit irgendner matrix \tilde{B} und dann einmal $P^H A P$ mit dem Spektralprojektor lösen. (heißt: einmal großes Problem und einmal kleines Problem)

In diesem Abschnitt soll mit Hilfe eines einfachen Beispiels die eben erarbeitete Theorie verifiziert werden. Dafür betrachten wir die beiden Matrizen $A, B \in \mathbb{C}^{n,n}$, welche durch

$$A := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad B := \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/4 \end{bmatrix}$$

gegeben sind. Durch einfaches Nachrechnen überprüft man, dass das verallgemeinerte Eigenwertproblem (2.7) durch Vektoren $x_1 \in \text{Span}_{\mathbb{C}}\{e_1\}$ mit zugehörigem Eigenwert $\lambda_1 = 0$, Vektoren $x_2 \in \text{Span}_{\mathbb{C}}\{e_2\}$ mit zugehörigem Eigenwert $\lambda_2 = 2$, sowie Vektoren $x_3 \in \text{Span}_{\mathbb{C}}\{e_3\}$ mit zugehörigem Eigenwert $\lambda_3 = -4$ gelöst wird.⁶

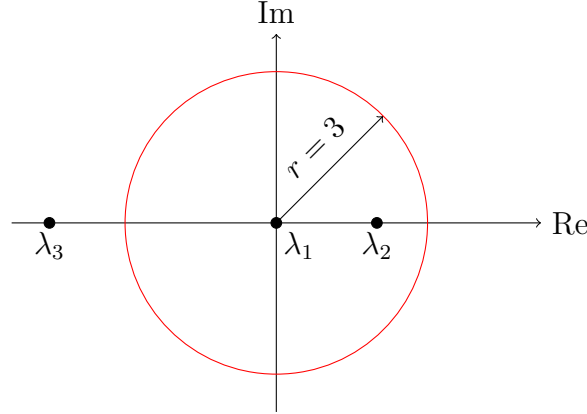
Wir wollen nun auf dem reellen Intervall $[-3, 3]$ die Eigenpaare bestimmen. Als Integrationskontur wählen wir daher den Kreis mit einem Radius von drei Längeneinheiten und dem Mittelpunkt im Ursprung. Das heißt, wir werden die GREEN-Funktion G über die Kurve

$$\gamma: [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{C}^n, \varphi \mapsto 3e^{i\varphi} \quad (2.8)$$

integrieren. Da nach Konstruktion keiner der Eigenwerte auf dem Graphen von γ liegt, ist G auf der gesamten Kontur wohldefiniert.

Zunächst überprüfen wir die Identität (??). Mit $x_1 := \begin{bmatrix} \sqrt{2}i & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$ und $x_2 := \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2}i & 0 \end{bmatrix}^T$ sind zwei passende Eigenvektoren für unser Eigenwertproblem gege-

⁶Hier bezeichnen $e_1, e_2, e_3 \in \mathbb{C}^n$ die kanonischen Einheitsvektoren.

Abbildung 2.1: Skizze der Kurve γ in der komplexen Ebene.

ben, und in der Tat gilt

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{2\pi\iota} \int_{\gamma} G(\omega) \, d\omega &= -\frac{1}{2\pi\iota} \int_0^{2\pi} G(\gamma(\omega)) \cdot \gamma'(\omega) \, d\omega \\
 &= -\frac{1}{2\pi\iota} \int_0^{2\pi} \begin{bmatrix} \frac{2}{3e^{\iota\omega}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3e^{\iota\omega}-2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{3e^{\iota\omega}+4} \end{bmatrix} \cdot 3\iota e^{\iota\omega} \, d\omega \\
 &= \text{diag}(-2, -2, 0) \\
 &= x_1 x_1^T + x_2 x_2^T.
 \end{aligned}$$

Als Nächstes überprüfen wir, ob die Matrix $X_2 := \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}$ mit Hilfe der in Abschnitt ?? beschriebenen Methode rekonstruierbar ist.

Dort wird von uns zunächst die Konstruktion der Matrix Q aus (??) verlangt. Da wir bereits wissen, dass wir zwei Eigenvektoren finden wollen, wählen wir also beliebig eine Matrix $Y_2 \in \mathbb{C}^{3,2}$ vollen Ranges – die wir in diesem Beispiel mit $Y_2 := \begin{bmatrix} e_1 & e_1 + e_2 \end{bmatrix}$ festlegen wollen – und multiplizieren diese von rechts an das Integral der GREEN-Funktion über die durch (2.8) definierte Kontur.⁷ Wir erhalten somit

$$Q = -\frac{1}{2\pi\iota} \left(\int_{\gamma} G(\omega) \, d\omega \right) \cdot Y_2 = \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & -2 \\ 0 & -2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Nun lösen wir das in (??) beschriebene Eigenwertproblem. Wir suchen also Paare

⁷Es mag den Leser verwundern, wie bei Unkenntnis über die Anzahl $k \in \mathbb{N}$ der zu findenden Eigenvektoren die Spaltenzahl von Y_k korrekt zu ermitteln ist. Eine gängige Methode ist zum Beispiel das Konstruieren einer passenden Filterfunktion, welche die nicht erwünschten Eigenwerte aussortiert (Vgl. Abschnitt ??).

$(\mu, \phi) \in \mathbb{C} \times \mathbb{C}^n$ die der Gleichung

$$A_Q \phi = \mu B_Q \phi$$

genügen. Durch Nachrechnen überzeugt man sich davon, dass dieses von allen Vektoren $\phi_1 \in \text{Span}_{\mathbb{C}}\{e_1\}$ mit dem Eigenwert $\mu_1 = 0$ sowie allen Vektoren $\phi_2 \in \text{Span}_{\mathbb{C}}\{-e_1 + e_2\}$ mit dem Eigenwert $\mu_2 = 2$ gelöst wird.

Die soeben ermittelten Eigenwerte stimmen also schon mit den Eigenwerten unseres betrachteten Problems überein. Wählen wir schließlich die Matrix

$$\Phi_2 := \begin{bmatrix} \phi_1 & \phi_2 \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} -\iota/\sqrt{2} & \iota/\sqrt{2} \\ 0 & -\iota/\sqrt{2} \end{bmatrix},$$

mit den Eigenvektoren ϕ_1 und ϕ_2 , so erhalten wir wie gewünscht

$$Q\Phi_2 = \begin{bmatrix} -2 & -2 \\ 0 & -2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\iota/\sqrt{2} & \iota/\sqrt{2} \\ 0 & -\iota/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}\iota & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\iota \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = X_2.$$

Bemerkung. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die Matrix Φ_2 aus kosmetischen Gründen gerade so gewählt wurde, dass die Kalkulation am Ende X_2 ergibt und somit alles hübsch anzusehen ist. Der Wahl einer anderen Matrix Φ'_2 mit skalaren Vielfachen der hier gewählten Eigenvektoren steht selbstverständlich nichts im Wege und führt freilich zu einer anderen Matrix X'_2 , deren Spalten ebenfalls zulässige Eigenvektoren enthält.

Kapitel 3

Beschleunigung durch rationale Funktionen

In diesem Kapitel soll demonstriert werden, dass Konturintegration und Rayleigh-Ritz-Verfahren in einem engen Zusammenhang stehen **wird sich noch zeigen**. Um dies zu untermauern, orientieren sich die folgenden Absätze an den Ausführungen von Ping Tak Peter Tang und Eric Polizzi in [TP16]. Allerdings wird die Notation im Sinne der Konsistenz an einigen Stellen abweichen.

3.1 Beschleunigtes Rayleigh-Ritz Verfahren

Betrachten wir also wie bisher das verallgemeinerte Eigenwertproblem mit zwei komplexwertigen, hermiteschen $(n \times n)$ -Matrizen A und B und fordern zusätzlich die positive Definitheit von B . Zu diesem Duo gesellt sich nun mit $p(B^{-1}A)$ ein Polynom in $B^{-1}A$, welches wir benutzen um gemäß dem oben zitierten Paper den Algorithmus () aus dem vorigen Kapitel wie folgt zu ändern.

Algorithmus 1 Beschleunigtes iteratives Rayleigh-Ritz-Verfahren

- 1: Wähle m Zufallsvektoren $Q_{(0)} \leftarrow [q_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$. Setze $k \leftarrow 1$.
 - 2: **repeat**
 - 3: Approximiere den Unterraumprojektor: $Y_{(k)} \leftarrow p(B^{-1}A)Q_{(k-1)}$
 - 4: Reduziere die Dimension: $\tilde{A}_{(k)} \leftarrow Y_{(k)}^H A Y_{(k)}$, $\tilde{B}_{(k)} \leftarrow Y_{(k)}^H B Y_{(k)}$.
 - 5: Löse das transformierte Problem $\tilde{A}_{(k)}\tilde{X}_{(k)} = \tilde{B}_{(k)}\tilde{X}_{(k)}\tilde{\Lambda}_{(k)}$ in $\tilde{X}_{(k)}$ und $\tilde{\Lambda}_{(k)}$.
 - 6: Setze $Q_{(k)} \leftarrow Y_{(k)}\tilde{X}_{(k)}$.
 - 7: $k \leftarrow k + 1$.
 - 8: **until** Abbruchkriterium ist erfüllt.
-

Das Polynom p wird in diesem Kontext auch als *Filter* oder *Beschleuniger* bezeichnet. Von dessen Wahl hängt nämlich ab, ob und wie gut Eigenpaare approximiert werden. Es ist sogar möglich, gezielt solche Eigenpaare zu finden, wie sie im Ab-

schnitt 2.2 gesucht waren.

Um dies einzusehen, greifen wir erneut die Notationen aus besagtem Kapitel auf: Es sei $[\lambda_1, \lambda_2]$ dasjenige Intervall, auf dem die Eigenwerte und korrespondierenden Eigenvektoren gefunden werden sollen und X_k sei diejenige Matrix dessen Spalten aus gerade diesen Eigenvektoren besteht. Es wurde bereits diskutiert, dass die durch Konturintegration ermittelten Eigenvektoren B -orthogonal sind. Damit lässt sich also – wie im Satz 2.3 bewiesen – der Spektralprojektor $P = X_k X_k^H B$ konstruieren. Falls nun $p(B^{-1}A)$ mit diesem Projektor übereinstimmt, dann terminiert Algorithmus 3.1 im Falle der Vollrangigkeit von $Y_{(1)}$ nach einer Iteration.¹ Dies folgt unter Ausnutzung der Invarianz des Bildes von $PQ_{(0)}$ unter $B^{-1}A$ aus dem Satz 2.1.

Da der Spektralprojektor in den meisten Fällen unbekannt sein dürfte, liegt die Idee nahe, ihn zumindest zu approximieren. Da in [TP16, S. 356] bemerkt wird, dass dies gut funktioniert, wenn p eine durch *Gauß-Legendre-Quadratur* konstruierte rationale Funktion ist, wird sich das folgende Intermezzo mit eben dieser Klasse von Funktionen beschäftigen, bevor wir mit der Konstruktion des Projektors fortfahren.

3.2 Rationale Funktionen

Ausgehend von zwei Polynomen $p, q \in \mathbb{C}[t]$ mit

$$p := \sum_{k=0}^n p_k t^k \quad \text{und} \quad q := \sum_{k=0}^n q_k t^k$$

definieren wir eine rationale Funktion $\varrho: \mathbb{C} \setminus N_q \rightarrow \mathbb{C}$ vermöge

$$\varrho(t) := \frac{p(t)}{q(t)}$$

und identifizieren wie üblich die Unbestimmte t mit den Argumenten von p und q . Dabei ist $N_q := \{t \in \mathbb{C} \mid q(t) = 0\}$. Eine rationale Funktion wird als *echt gebrochen* bezeichnet, falls die Bedingung $\text{Grad}(p) < \text{Grad}(q)$ erfüllt ist.

3.3 Approximation des Spektralprojektors

Nun da die für den weiteren Verlauf der Arbeit wichtigen Eigenschaften rationaler Funktionen wiederholt wurden, widmen wir uns der Approximation des Spektral-

¹ Hierbei ist entscheidend, dass die Anzahl der Spalten von Q mit der Anzahl der Eigenpaare übereinstimmt, die auf dem Intervall zu finden sind (Vgl. [TP16, S. 356]).

projektors $P = X_k X_k^H B$. Dafür setzen wir den in Abschnitt 3.1 bereits begonnenen Gedankengang aus [TP16] fort und übernehmen die zu letzt vereinbarten Voraussetzungen und Notationen.

Wenden wir uns also wieder dem reellen Intervall $I := [\lambda_1, \lambda_2]$ zu. Das Ziel ist die Konstruktion einer rationalen Funktion $\varrho: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ mit $\varrho|_{\mathbb{R}} \subseteq \mathbb{R}$, die auf I näherungsweise der Indikatorfunktion von I entspricht. Dazu bemühen wir die Cauchy'sche Integraldarstellung der Indikatorfunktion und wandeln diese mit Hilfe numerischer Quadraturformeln in die gewünschte rationale Funktion ϱ um.

Zuächst zur Indikatorfunktion: Ist $c \in \mathbb{R}$ der Mittelpunkt des Intervalls I und r der Abstand des Mittelpunktes zum Rand des Intervalls, dann entspricht die Menge

$$\mathcal{C} := \{z \in \mathbb{C} : |z - c| = r\}$$

gerade einer Sphäre mit Radius r um c . Mit dem Cauchy'schen Integralsatz lässt sich zeigen, dass im Falle $z \notin \mathcal{C}$

$$\frac{1}{2\pi\iota} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{\omega - z} d\omega = \begin{cases} 1 & \text{falls } |z - c| < r \\ 0 & \text{falls } |z - c| > r \end{cases}$$

gilt. Dieses Integral gilt es nun zu approximieren. **wie genau?** (Vgl. [Jäge, S. 20]).

Wir werden das eben diskutierte Integral mit einer Gauß-Legendre Quadraturformel annähern. Dazu ist es nötig die Kontur \mathcal{C} so zu parametrisieren, dass eine Transformation der Integrationsgrenzen auf das Intervall $[-1, 1]$ möglichst einfach möglich ist. Zu diesem Zweck sei

$$\begin{aligned} \gamma: [-1, 3] &\rightarrow \mathbb{C} \\ t &\mapsto c + r e^{\iota \frac{\pi}{2}(1+t)} \end{aligned}$$

als Parametrisierung der Sphäre gewählt. Die Ableitung von γ ist dann für jedes $t \in [-1, 3]$ durch

$$\gamma'(t) = \iota \frac{\pi}{2} r e^{\iota \frac{\pi}{2}(1+t)}$$

gegeben. Mit den bekannten Regeln der Integration erhalten wir somit für alle $z \notin \mathcal{C}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi\iota} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{\omega - z} d\omega &= \frac{1}{2\pi\iota} \int_{-1}^3 \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt \\ &= \frac{1}{2\pi\iota} \left(\int_{-1}^1 \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt + \int_1^3 \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt \right) \\ &= \frac{1}{2\pi\iota} \left(\int_{-1}^1 \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt + \int_{-1}^1 \frac{\gamma'(2-t)}{\gamma(2-t) - z} dt \right) \\ &= \frac{1}{2\pi\iota} \int_{-1}^1 \left(\frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt + \frac{\overline{\gamma'(t)}}{\overline{\gamma(t)} - z} dt \right) \end{aligned}$$

wobei $\overline{\gamma(t)}$ und $\overline{\gamma'(t)}$ die komplexen Konjugationen von $\gamma(t)$ beziehungsweise $\gamma'(t)$ bezeichnen.

Für $q \in \mathbb{N}$ mit **wie groß ist q genau?** seien $(w_j, t_j)_{j=1:q}$ die für die Gauß-Legendre-Quadratur benötigten Gewichte und Diskretisierungspunkte. Dann setzen wir

$$\varrho(z) := \frac{1}{2\pi\iota} \sum_{j=1}^q \left(\frac{w_j \cdot \gamma'(t_j)}{\gamma(t_j) - z} - \frac{w_j \cdot \overline{\gamma'(t_j)}}{\overline{\gamma(t_j)} - z} \right)$$

und erhalten nach der Substitution $\gamma(t_j) := \gamma_j$ und $\sigma_j := w_j \gamma'(t_j)/(2\pi\iota)$ die gewünschte rationale Funktion

$$\varrho: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}, z \mapsto \sum_{j=1}^q \left(\frac{\sigma_j}{\gamma_j - z} + \frac{\overline{\sigma_j}}{\overline{\gamma_j} - z} \right)$$

zur Approximation der Indikatorfunktion. Hierbei ist bemerkenswert, dass die rationale Funktion bereits in Partialbruchzerlegung vorliegt.

Wir wollen uns nun davon überzeugen, dass der Gebrauch der eben erarbeiteten Quadratur eine sinnvolle Wahl ist.

Erinnerung an Konturkapitel: ... weiter auf Seite 358

3.4 Der FEAST-Algorithmus

Anhang A

yolo

Sed commodo posuere pede. Mauris ut est. Ut quis purus. Sed ac odio. Sed vehicula hendrerit sem. Duis non odio. Morbi ut dui. Sed accumsan risus eget odio. In hac habitasse platea dictumst. Pellentesque non elit. Fusce sed justo eu urna porta tincidunt. Mauris felis odio, sollicitudin sed, volutpat a, ornare ac, erat. Morbi quis dolor. Donec pellentesque, erat ac sagittis semper, nunc dui lobortis purus, quis congue purus metus ultricies tellus. Proin et quam. Class aptent taciti sociosqu ad litora torquent per conubia nostra, per inceptos hymenaeos. Praesent sapien turpis, fermentum vel, eleifend faucibus, vehicula eu, lacus.

Literatur

- [Bar15] Marc van Barel. “Designing rational filter functions for solving eigenvalue problems by contour integration.” In: (2015).
- [Ber16] Mario Berljafa. “Rational Krylov Toolbox for MATLAB.” In: (2016).
- [Jäge] Klaus Jänich. *Funktionentheorie. Eine Einführung*. Irgendein Jahr.
- [Lie13] Jrg Liesen. *Krylov subspace methods. Principles and analysis*. 2013.
- [Pol09] Eric Polizzi. “Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems.” In: (2009).
- [Ste13] Gilbert W. Stewart. *Matrix algorithms*. Bd. 2: Eigensystems. 2013.
- [TP16] Ping Tak Peter Tang und Eric Polizzi. “Feast as a subspace iteration eigensolver accelerated by approximate spectral projection.” In: (2016).