# Evaluation de fonctions de matrices et algorithmes pararéels : Séances de travail du 13.1.2014 au 17.01.2014

J.-P. Chehab & M. Petcu

January 23, 2014

Les séances de travail du 13.01.2014 au 17.01.2014 ont permis, d'une part, d'avancer très significativement dans certaines pistes déjà entamées en 2013 et, d'autre part, de dégager une nouvelle direction complétant la précédente. L'utilisation de méthodes de Monte Carlo pour l'évaluation de fonctions de matrices un premier temps abordée au début du projet sera développée plus tard. Nous visons à rassembler l'ensemble des résultats qui seront obtenus sous forme d'article.

## 1 Solution en temps fini

### 1.1 Approche générale

Les méthodes pararéelles, qui peuvent être vues comme des algorithmes de tir à pas multiples, permettent d'accélérer le calcul numérique de la solution d'une ODE jusqu'en un temps $T$ prescrit. Dans un premier temps, nous avions considéré une famille d'ODE dont la solution au temps canonique $T = 1$ était l'évaluation en une matrice $A$ donnée d'une fonction de matrice $f$. Les équations différentielles peuvent se construire en utilisant une homotopie, comme suit

$$\frac{dX}{dt} = F(X(t)), t \in (0,1) \tag{1}$$
$$X(0) = X_0 \tag{2}$$

avec $X(1) = f(A)$. On pose $A(t) = X_0 + t(A - X_0)$ et on définit $X(t) = f(A(t))$ ; $X_0$ est choisi de sorte à ce que $f(X_0)$ soit facile à calculer, voir [1]. Sous certaines conditions, nous avons

$$\frac{dX}{dt} = \frac{dA}{dt} f'(f^{-1}(X(t))), t \in (0,1), \tag{3}$$
$$X(0) = X_0. \tag{4}$$

L'inverse de $A$ au temps $T = 1$ peut ainsi être obtenue. D'autres équations peuvent être construites en utilisant la caractérisation par ODE des fonctions à évaluer, telles sin, cos,exp, donnant lieu à des évaluations matricielles de propagateurs pour les discrétisations des équations de la chaleur, de Schrodinger, par exemple. On pourra aussi consulter [6, 7]

### 1.2 Technique d'espaces de Krylov

Les techniques d'espaces de Krylov développées par M. Petcu et M. Gander,[3, 4], ont été adaptées pour les calculs matriciels, s'appuyant aussi sur les travaux de Jbilou *et al* [8, 9]. Les codes numériques produits en Matlab donnent des résultats très encourageants. Ils ont été testés notamment sur $f(x) = \sin(x)$.

## 2 Solution asymptotique et contrôle

### 2.1 Approche générale

Certaines évaluations de fonctions de matrices peuvent se définir simplement comme états asymptotiques d'une équation différentielle. Par exemple, pour $A$ SPD, la fonction $X(t)$, solution de

$$\frac{dX}{dt} = Id - AX, \tag{5}$$

$$X(0) = X_0 \tag{6}$$

converge vers $A^{-1}$ lorsque $t \to +\infty$. De manière générale, s'il existe une fonction $G$ telle que $G(X, A) = 0 \iff X = f(A)$ on considère l'EDO

$$\frac{dX}{dt} = G(X, A), \tag{7}$$

$$X(0) = X_0, \tag{8}$$

et, moyennant des hypothèses standards de stabilités, on pourra approcher numériquement $f(A)$ par un schéma explicite, en considérant un intervalle de temps d'intégration assez grand. Ceci n'est pas propice à la mise en œuvre de schémas pararéels. Une première idée pour se ramener comme plus haut à un temps $T$ fini, $T = 1$ par exemple, est d'introduire un contrôle $V(t)$ comme suit : on définit $X_V$ solution de

$$\frac{dX_V}{dt} = G(X_V, A) + V(t), \; t \in (0, 1) \tag{9}$$

$$X_V(0) = X_0 \tag{10}$$

de sorte à ce que $X_V(1) = f(A)$ ou bien $G(X_V(1), A) = 0$. En fait nous relaxons cette dernière condition en termes de contrôle optimal en choisissant pour fonction coût

$$J(x_V, V) = \alpha \parallel G(X_V(1), A \parallel_F^2 + \gamma \int_0^1 \parallel V(t) \parallel_F^2 \, dt$$

Le problème se réécrit donc comme

$$\inf_{V / \frac{dX_V}{dt} = G(X_V, A) + V(t)} J(X_V, V)$$

Dans un article récent [2], Du *et al* ont considéré cette approche pour utiliser une méthode pararéelle dans le cas d'équations paraboliques linéaires ; en pratique la méthode pararéelle est utilisée comme préconditionnement de la matrice de propagation en temps sur la grille fine, matrice qui apparaît dans le complément de Schur du système exprimant les relations d'optimalité (KKT). Nous nous proposons d'adapter leur technique au cas matriciel.

## 2.2 Cas creux

Dans ce même formalisme, il est également possible de déterminer des approximations creuses. Pour cela, on ajoute une contrainte supplémentaire portant sur la répartition des coefficients non nuls. Soit $\mathcal{F} = \{(i,j) \in I \times J\}$, où $I$ et $J$ sont des sous-ensembles d'indices de $\{1, \cdots, n\}$. Le problème considéré est alors

$$\inf_{V/\frac{dX_V}{dt}=G(X_V,A)+V(t),\ V\in\mathcal{F}} J(X_V, V)$$

# References


[1] J.-P. Chehab, Differential equations and inverse preconditioners, Computational and Applied Mathematics, Vol 26, N1, pp 1-34 (2007)

[2] Xiuhong Du, Marcus Sarkis, Christian E. Schaerer, and Daniel B. Szyld, Inexact and truncated Parareal-in-time Krylov subspace methods for parabolic optimal control problems, Electronic Transactions on Numerical Analysis, vol. 40 (2013) pp. 36-57.

[3] M. Gander et M. Petcu, Analysis of the modified parareal algorithm for second-order ordinary differential equations, AIP Conference Proceedings: Numerical Analysis and Applied Mathematics, 233-236, (2007)

[4] M. Gander et M. Petcu, Analysis of a Krylov subspace enhanced parareal algorithm for linear problems. ESAIM Proc, 25:114-129, November 25, (2008)

[5] M. Gander et S. Vandewalle, Analysis of the parareal time-parallel time-integration method, SIAM J. Sci. Comput., Vol. 29, No. 2, pp. 556–578, (2007)

[6] Gareth I. Hargreaves and Nicholas J. Higham , Efficient algorithms for the matrix cosine and sine, Numerical Algorithms (2005) 40: 383400

[7] N. Higham, Functions of Matrices: Theory and Computation, SIAM, 2008. xx+425 pages

[8] K. Jbilou, A. Messaoudi , H. Sadok, Global FOM and GMRES algorithms for matrix equations, Applied Numerical Mathematics 31 (1999) 4963

[9] R. Bouyouli, K. Jbilou, R. Sadaka, H. Sadok, Convergence properties of some block Krylov subspace methods for multiple linear systems, Journal of Computational and Applied Mathematics, Volume 196 Issue 2, 15 November 2006 Pages 498 - 511

[10] Cleve Moler, Charles Van Loan, Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later, SIAM REVIEW, 2003 Vol. 45, No. 1, pp. 3000