Evaluation de fonctions de matrices et algorithmes pararéels : Séance de travail du 90.1.2013 au 11.01.2013

J.-P. Chehab & M. Petcu

January 30, 2013

1 Démarrage du projet

Nous avons convenu de démarrer le projet en mettant en œuvre l'algorithme pararéel tel que présenté dans [6] pour l'évaluation numérique de fonction de matrices $f(A)$ correspondant à l'état en temps fini de la solution de certains systèmes différentiels matriciels :

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

avec $X(1) = f(A)$. A cet effet nous utilisons une technique d'homothopie, en introduisant $A(t) = X_0 + t(A - X_0)$ et on pose $X(t) = f(A(t))$; X_0 est choisi de sorte à ce que $f(X_0)$ soit facile à calculer. On a alors, sous certaines conditions,

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

Exemples

1. $f(A) = A^{-1} : A(t) = Id + t(A - Id)$, [3]

$$\frac{dX}{dt} = -X(t)(A - Id)X(t), t \in (0,1) \tag{5}$$
$$X(0) = Id. \tag{6}$$

2. $f(A) = \sin(A) : A(t) = tA$. On pose $X(t) = \sin(A(t)),\ Y(t) = \cos(A(t))$

$$\frac{dX}{dt} = AY(t), t \in (0,1) \tag{7}$$
$$\frac{dY}{dt} = -AX(t), t \in (0,1) \tag{8}$$
$$X(0) = 0, Y(0) = Id. \tag{9}$$

Pour éviter des problèmes d'instabilité, on suit [7], en calculant d'abord $\sin(2^{-m}A)$ avec m tel que

$$2^{-m} \parallel A \parallel_\infty \leq 1$$

Une étape de post-traitement consiste à calculer d'abord $\cos(A)$ en utilisant successivement la formule trigonométrique $cos(2x) = 2cos^2(x) - 1$, soit

$$\begin{array}{l} C_0 = \cos(2^{-m}A) = Y(1), \\ \text{Pour } k = 0, \cdots m-1 \\ \qquad\qquad C_{k+1} = 2C_k^2 - Id, \\ \text{Fin} \\ C_m = \cos(A) \end{array}$$

Les applications visées dans un premier temps concernent le calcul numérique de propagateurs discrets , tels que

$e^{-\Delta t A}$ (problèmes paraboliques) ; $e^{-i\Delta t A}$ (équation de Schrodinger) ; $\sqrt(A), \sin(A), \cos(A)$ (équation des ondes).

D'autres applications peuvent être proposées, voir [8].

2 Travail effectué

1. Ecriture d'un code pararéel (Matlab) pour l'évaluation de $\sin(A)$.
2. M. Petcu adapte les techniques de Krylov développées avec M. Gander,[4, 5] pour l'évaluation de $\sin(A)$. En particulier l'adaptation des méthodes de Krylov au cas matricielle est important (partie Arnoldi), on s'appuiera sur les travaux de Jbilou *et al* [9, 10]

   Le code pourra être adapté à d'autres équations et servira de base.
3. (JPC) Estimation des coefficients d'une matrice à partir de produits matrice-vecteurs et méthodes de Monte-Carlo. Algorithme simple, inspiré de celui introduit par Bai et Golub [1]

$$\begin{array}{ll} \text{On se donne} & p_1, p_2 \\ \text{Pour } k = 1, \cdots, p_2 & \\ \text{Construire} & Z_k, \text{ matrice sample } n \times p_1 \\ & \\ \text{Poser} & \tilde{A} = \frac{1}{p_1 p_2} \sum_{k=1}^{p_2} (AZ_k) Z_k^T \end{array}$$

   Numériquement, on observe que $\tilde{A}$ est une bonne approximation de A, en norme infini mais aussi que le spectre de A est bien approché pourvu que p_1 et p_2 soient assez grands. Ici les échantillons choisis sont $(Z_k)_{i,j} = -1$ ou 1 avec probabilité de $\frac{1}{2}$.

M. Petcu et J.-P. Chehab ont par ailleurs discuté avec L. Badea sur des points de contacts en méthodes pararéelles et de décomposition de domaine.

3 Quelques idées

1. Recherche d'un moyen de calculer l'approximation creuse de $f(A)$ en temps fini.
   Idée de départ : étant donné un filtre fixe $\mathcal{F}$ construire un filtre $\mathcal{F}(t)$ tel que la solution $Y(t)$ de

$$\frac{dY}{dt} = \mathcal{F}(t).*F(Y(t)), t \in]0, 1) \tag{10}$$

$$Y(0) = Y_0. \tag{11}$$

   vérifie (en un sens à préciser) $Y(1) = \mathcal{F}.*f(A)$. Il faut donc construire $\mathcal{F}(t)$ de sorte à minimiser $\| Y(1) - \mathcal{F}.*f(A) \|_F$. Ici $.*$ désigne le produit d'Hadamard.

   (a) Algo rudimentaire : Poser $\mathcal{F}(0) = \mathbf{1} = \texttt{ones}$, l'élément neutre de $.*$ et calculer $\mathcal{F}(t)$ par interpolation linéaire.

   (b) Calculer sur une grille grossière (en temps) $f(A)$ puis $\mathcal{F}(k\Delta t)$. Etendre $\mathcal{F}(k\Delta t)$ par interpolation sur la grille fine et coupler avec pararéel (???)

2. Calcul des coefficients d'une matrice par une méthode de Monte Carlo

   (a) Essayer de quantifier le rôle de p_1 et de p_2 dans la convergence

   (b) voir si on peut adapter les techniques de Bai et Golub pour démontrer quelque chose

   (c) Peut-on relier ceci à une équation différentielle ?

   Remarque : l'algorithme doit pouvoir être amélioré en utilisant des échantillons du type matrices d'Hadamard voir [2] pour l'estimation de la partie diagonale dune matrice.

References

[1] Zhaojun Bai, Mark Fahey, Gene Golub, Some large-scale matrix computation problems, Journal of Computational and Applied Mathematics 74 (1996) 71-89

[2] C. Bekas, E. Kokiopoulou, Y. Saad, An Estimator for the Diagonal of a Matrix, Journal Applied Numerical Mathematics,Volume 57 Issue 11-12, November, 2007, Pages 1214-1229

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

[4] 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)

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

[6] 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)

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

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

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

[10] 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

[11] 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