§3. Méthodes itératives pour le calcul de $f(A)$ ou $f(A)b$

(ou de Rayleigh-Ritz)

§3.1. Approximation d'Arnoldi pour $f(A)\cdot b$

Bien souvent A est de très grande taille rendant le calcul de $f(A)$ infaisable, et donc il faut des méthodes particuliers (basées sur produits de A avec un vecteur) pour approcher $f(A)\cdot b$.

Dans une méthode de projection, on dispose d'une base orthonormée $v_1, v_2, \ldots, v_m$ d'un espace $\mathcal{K}_m \subset \mathbb{C}^n$ de dimension m, arrangés sous forme de matrice $V_m = (v_1, \ldots, v_m) \in \mathbb{C}^{n\times m}$, avec $v_1 = \frac{b}{\|b\|}$ (dans la suite $\|b\|=1$ sans perte de la généralité), et on pose

$$x_m := V_m f(A_m)\cdot V_m^* b \approx x = f(A)b$$

dite approximation d'Arnoldi d'ordre $m \ll n$ bien plus avec $A_m := V_m^* A V_m$ ~~petit~~, ce qui justifie que x_m est "facile" à calculer.

Notons que $V_m^* b = V_m^* v_1 = e_1$, il faut donc connaître la première colonne de $f(A_m)$, et stocker V_m! → recto

3.1.1. Espaces de Krylov (polynomiaux)

Ici on considère $\mathcal{K}_m = \mathcal{K}_m(A,b) = \mathrm{span}\{b, Ab, \ldots, A^{m-1}b\}$, ici supposé de dimension m. Connaissant une base orthonormée $v_1, \ldots, v_j$ de $\mathcal{K}_j \subset \mathcal{K}_{j+1}$ il suffit donc trouver $v_{j+1} \in \mathcal{K}_{j+1}$ de norme 1 orthogonal à $v_1, \ldots, v_j$. Ceci se fait par le procédé d'Arnoldi [Saad], en rendant

$A v_j \perp$ à $v_1, \dots, v_j$ et en normalisant, donnant lieu à une récurrence

$$A v_j - v_1 h_{1j} - \dots - v_j h_{jj} = h_{j+1,j} \cdot v_{j+1}$$

qui s'écrit sous forme matricielle

$$A V_m = V_{m+1} \cdot \overline{H}_m \quad \text{avec } \overline{H}_m \in \mathbb{C}^{m+1 \times m}$$

de forme Hessenberg supérieure. En particulier,

$$A_m = V_m^* A V_m = [I_m, 0] \overline{H}_m \; (= H_m).$$

3.1.2. Lemme : exactitude :

$\forall p \in \mathbb{P}_{m-1}$, approximation pol. d'Arnoldi coïncide avec $p(A) b$.

Preuve : Il suffit de montrer le lemme pour $p(x) = x^k$, $k = 0, \dots, m-1$ par recurrence sur k.

$k=0$: $V_m p(A_m) V_m^* b = V_m V_m^* b = b$, car $b \in \mathcal{K}_m$.

$k-1 \Rightarrow k$: $p_k(A) b \in \mathcal{K}_m \Rightarrow$

$$p_k(A) b = V_m V_m^* A \cdot A^{k-1} b$$

$$= V_m \underbrace{V_m^* A \; V_m}_{= A_m} A_m^{k-1} V_m^* b = V_m p(A_m) b$$

3.1.3. Corollaire Soit $p_m \in \mathbb{P}_{m-1}$ interpolant pour (f, A_m)

alors $V_m f(A_m) V_m^* b = p_m(A) b$.

($\Rightarrow$ erreur est erreur d'interpolation !)

Avant de faire le lien avec le §1.5, regardons d'abord une généralisation.

3.1.4. Espaces de Krylov rationnels

Ici on se donne des paramètres $z_j \in (\mathbb{C} \cup \{\infty\}) \setminus \sigma(A)$

ici $z_j \neq 0$ (sinon translation), on définit

$$q_k(z) = \prod_{\substack{j=1 \\ z_j \neq \infty}}^{k} \left(1 - \frac{z}{z_j}\right), \quad \text{et } \tilde{\mathcal{K}}_m = \text{span}\left(A^k q_k(A)^{-1} b : k = 0, \dots, m-1\right)$$

encore une fois supposé de dimension m,

Il nous faudra que f soit défini sur $\sigma(A_m)$.
Condition suffisante : f analytique dans voisinage de $W(A)$ car $W(A_m) = \left\{ \frac{y^* A_m y}{y^* y} : y \in \mathbb{C}^m \setminus \{0\} \right\}$
$= \left\{ \frac{x^* A x}{x^* x} : x = V_m y \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\} \right\} \subset W(A)$.

Ici on n'expose pas un algorithme pour calculer les v_j, V_m et A_m, voir par exemple [BB, Reichel] ou les travaux originaux de A. Ruhe.

Pour des raisons purement <u>théoriques</u>, il est utile d'observer que $\tilde{\mathcal{K}}_m = \{ \frac{p}{q_{m-1}}(A)b : p \in \mathcal{P}_{m-1} \}$ $= \mathcal{K}_m(A, q_{m-1}(A)^{-1}b)$ (mais en pratique on ne calcule pas $q_{m-1}(A)^{-1}b$).

3.1.5. <u>Lemme</u>: exactitude dans le cas rationnel

Nous avons pour l'approximation d'Arnoldi rationnelle : $\forall r \in \mathcal{P}_{m-1}/q_{m-1}$: $V_m r(A_m) V_m^* b = r(A)b$ à condition que $q_{m-1}(A_m)$ inversible (par exemple si $z_j \in \overline{\mathbb{C}} \setminus W(A)$).

<u>Preuve</u> On note $c = q_{m-1}(A)^{-1}b$ et par $\tilde{V}_m$ la matrice ayant comme colonnes une base orthonormée de $\tilde{\mathcal{K}}_m = \mathcal{K}_m(A, c)$, $\hat{A}_m = \tilde{V}_m^* A \tilde{V}_m$.

Comme on a deux bases orthonormées du même espace, $\exists U$ unitaire : $V_m = \tilde{V}_m \cdot U$

et alors $V_m r(A_m) V_m^* b = \tilde{V}_m U r(A_m) U^* \tilde{V}_m^* b$

$= \tilde{V}_m r(U A_m U^*) \tilde{V}_m^* b = \tilde{V}_m r(\hat{A}_m) \cdot \tilde{V}_m^* b$.

Écrivons $r(z) = p(z)/q_{m-1}(z)$ avec $p \in \mathcal{P}_{m-1}$, alors d'après 3.1.2.

$$b = q_{m-1}(A)c = \tilde{V}_m q_{m-1}(\hat{A}_m) \tilde{V}_m^* c$$

$$\Rightarrow \tilde{V}_m^* b = q_{m-1}(\hat{A}_m) \tilde{V}_m^* c$$

aussi $r(A)b = p(A)c = \tilde{V}_m p(\hat{A}_m) \tilde{V}_m^* c$

$$= \tilde{V}_m p(\hat{A}_m) \cdot q_{m-1}(\hat{A}_m)^{-1} \tilde{V}_m^* b.$$

3.1.6. <u>Corollaire</u>

Soit $r_m \in \mathcal{P}_{m-1}/q_{m-1}$ interpolant (f, A_m) alors pour l'appr. d'Arnoldi rat. : $V_m f(A_m) V_m^* b = r_m(A)b$

3.1.7 : Remarque : lien avec fonctions orthogonales

Par construction $\forall j \geq 1 \, \exists \, \hat{p}_{j-1} \in \mathcal{P}_{j-1}$ de sorte

$$v_j = \hat{r}_{j-1}(A) b \,, \quad \hat{r}_{j-1} = \frac{\hat{p}_{j-1}}{q_{j-1}} \,.$$

En considérant le "produit scalaire"

$$\langle P, Q \rangle := (Q(A)b)^* (P(A)b)$$

(qui est seulement semi-définie positif) que on obtient l'orthogonalité

$$\forall j, k = 0, \dots, m-1 \; : \; \langle \hat{r}_j, \hat{r}_k \rangle = v_{k+1}^* v_{j+1} = \delta_{j,k}$$

Notons que d'après le lemme 3.1.5

$$v_{j+1} = V_m \cdot \hat{r}_j(A_m) e_1 \quad \text{d'où} \quad \hat{r}_j(A_m) e_1 = e_{j+1} \in \mathbb{C}^m.$$

Si on note les vecteurs auxiliaires $\tilde{v}_{m+1}$ par

$v_1, v_2, \dots, v_m, \hat{v}_{m+1}$ base orthonormée

pour pôles $z_1, z_2, \dots, z_{m-1}, \hat{z}_m = +\infty$

alors par la même raison $\tilde{v}_{m+1} = \tilde{r}_m(A) b$ avec $\tilde{r}_m = \tilde{p}_m / q_{m-1}$, $\tilde{p}_m \in \mathcal{P}_m$. Montrons que $\tilde{p}_m$ est un multiple non trivial du polynôme characteristique χ_m de A_m : $\exists c, c_0, \dots, c_{m-1} \in \mathbb{C}$: $\tilde{r}_m - c \dfrac{\chi}{q_{m-1}} = \sum_{j=0}^{m-1} \dfrac{p_j}{q_j} \cdot c_{j-1}$

En ecrivant $\chi(z) = (z-a) \cdot \tilde{\chi}(z)$:

$$V_m^* \frac{\chi}{q_{m-1}}(A) b = V_m^* (A-a) \cdot \frac{\tilde{\chi}}{q_{m-1}}(A) b \overset{3.1.5}{=} V_m^* (A-a) V_m \frac{\tilde{\chi}}{q_{m-1}}(A_m) \overset{V_m^*}{b}$$

$$= \frac{\chi}{q_{m-1}}(A_m) \cancel{V_m^*} b = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_{m-1} \end{pmatrix} = V_m^* \cdot \Big(\tilde{v}_{m+1} - c \frac{\chi}{q_{m-1}}(A) b \Big) = 0.$$

de même $\forall \chi \in \mathcal{P}_{m-1}$; $\dfrac{\chi}{q_{m-1}} = \sum c_j \dfrac{p_j}{q_j}$: $\dfrac{\chi}{q_{m-1}}(A_m) \underbrace{V_m^* b}_{e_1}$

$= \sum c_j e_j = \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_{m-1} \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \chi = 0 \Rightarrow$ le polynôme minimale de A_m est degré m, et l'interpolant dans 3.1.6. est unique.