

ALGÈBRE LINÉAIRE NUMÉRIQUE ET EQUATIONS DIFFÉRENTIELLES OU COMMENT MANIPULER DES MATRICES SANS AVOIR L'AIR D'Y TOUCHER

Jean-Paul Chehab

LAMFA, Université de Picardie Jules Verne, Amiens

Poitiers, 11 juin 2009

Observations : généralement les concepts et les techniques d'algèbre linéaire sont utilisés pour obtenir des résultats d'analyse ainsi que des méthodes de résolution d'EDO (stabilité, contrôle, schémas en temps)

Approche opposée : identifier la solution d'un problème d'algèbre linéaire à un état particulier d'un système différentiel (solution d'un système linéaire / non linéaire, factorisation d'une matrice, fonction d'une matrice ...).

Démarche : utiliser des outils et concepts d'analyse et d'analyse numérique des EDO pour construire et étudier des méthodes continues comme préludes aux schémas numériques : pour une ODE avec de "bonnes" propriétés de stabilité, l'algorithme de résolution est obtenu par discrétisation en temps à l'aide d'un schéma explicite → pléthore de méthodes.

un point d'équilibre asymptotique peut être calculé numériquement à l'aide d'un schéma explicite !

Pas nouveau !

- ▶ ADI, Richardson $\Longleftrightarrow$ Euler explicite
- ▶ Flots de gradient, flots isospectraux [1,2]
- ▶ Feed Back et méthodes de descente [3]
- ▶ Newton continu et systèmes dynamiques [4]

[1] D. Watkins, Isospectral flows, SIAM rev., 1984.

[2] U. Helmke, J. B. Moore, *Optimization and Dynamical Systems*, Springer, 1994 ;

[3] A. Bhaya, E. Kaszkurewicz (2003) ;

[4] H. Attouch *et al*, JMPA, 2002

PLAN

- ▶ Calcul de l'inverse d'une matrice
- ▶ Factorisation (Cholesky, LU)
- ▶ Méthodes de descente
- ▶ Variations sur la méthode de Cauchy
- ▶ Variations sur la méthode de Newton
- ▶ Conclusion

Collaborations with **M. Raydan** (UCV, Caracas), **J. Laminie** (Orsay, Pointe-à-Pitre)

I. Calcul de l'inverse d'une matrice (C 2002)

L'intégration numérique en temps permet de construire une inverse approchée, i.e. un préconditionneur inverse.

Inverse en temps fini

INVERSE EN TEMPS FINI

EDO matricielle de type Riccati

$$\frac{dQ}{dt} = -Q(Id - A)Q, Q(0) = Id$$

On a $Q(1) = A^{-1}$. Calculer numériquement $Q(1)$ par Euler, méthodes RK (comparable à une factorisation ILU pour RK4).

Propriétés : existence/ stabilité de la solution, estimations d'erreur pour Euler.

INVERSE COMME ÉTAT STATIONNAIRE (STABLE)

EDO matricielle de Riccati

$$\frac{dQ}{dt} = -Q(Id - AQ), Q(0) = Id$$

Euler explicite + $\Delta t = 1$ est Newton.

Version linéarisée

$$\frac{dQ}{dt} = -K(Id - AQ), Q(0) = Id$$

où K est une matrice fixée (un preconditionneur de A ou simplement Id)

Propriétés : symétrie, résultats de convergence

Problème : résolution par des schemas en temps produit des matrices dense.

Question : calcul d'une approximation creuse de l'inverse.

Peut-on construire un flot de matrices creuses ?

FLOT DE MATRICES CREUSES

$\mathcal{F}$ matrice filtre ou masque, $\mathcal{F}_{i,j} = 0$ ou 1 ; $'.*'$ produit d'Hadamard,
 $\mathcal{F}.*Id = Id$

$$\mathcal{F}.*\frac{dQ}{dt} = -\mathcal{F}.*(Id - AQ), Q(0) = \mathcal{F}.*Q_0$$

on définit S par $\frac{dS}{dt} = Id - \mathcal{F}.*(AS), S(0) = \mathcal{F}.*Q_0$

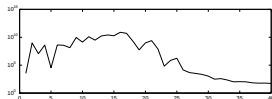
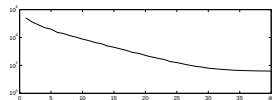
THÉORÈME

$$\begin{aligned} \|S - Q\|_F^2 &\leq 2 \times \|(1 - \mathcal{F}) * A^{-1}\|_F^2 \|Id - AQ_0\|_F^2 \times \{\|e^{-tA} - Id\|_F^2 \\ &\quad + \frac{1}{2\alpha} \int_0^t e^{-\alpha(t-s)} \|e^{-sA} - Id\|_F^2 ds\} \end{aligned}$$

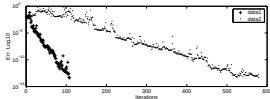
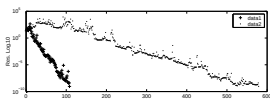
$1_{i,j} = 1$. $\mathcal{F} * S(t) = S(t)$ ($S(t)$ peut être creuse !), (A def. > 0)

Outil naturel : estimations d'énergie en norme de Frobenius

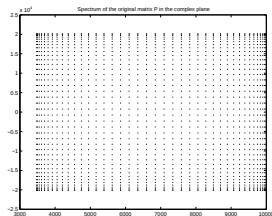
Remarque : on peut utiliser un masque variable $\mathcal{F}(t)$.



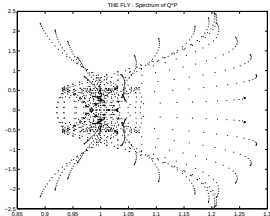
(a)



(b)



(c)



(d)

FIGURE: Precond. Discr. matrix $-\Delta + 500\partial_x + 20\partial_y + \text{HDBC}$

II. Factorizations de matrices (C 2007)

OBTENTION DU FLOT DE CHOLESKY

Soit A SDP, $A = S^T S$. On définit

$$\frac{dX}{dt} = S - X, \text{ ainsi } \frac{dX}{dt} = (S^T)^{-1} (S^T S - S^T X)$$

Si X est assez proche de S alors

$$\frac{dX}{dt} \simeq (X^T)^{-1} (A - X^T X)$$

$$\text{On définit } X \text{ par } \frac{dX}{dt} = \mathcal{F} * \{(X^T)^{-1} (A - X^T X)\}$$

$\mathcal{F}$ triangulaire supérieure ($\mathcal{F} = \text{triu}(\text{ones}(n, n))$) pour une fact. complète).

Ceci définit un flot de matrices triangulaires supérieures

Euler explicite avec $\Delta t \simeq 0.8$, ça marche !!

OBTENTION DU FLOT LU

$$\begin{cases} \frac{dP}{dt} = \mathcal{F} * ((A - PQ)Q^{-1}), & t > 0 \\ P_{i,i}(t) = 1, \\ P(0) = P_0 \end{cases}$$

et

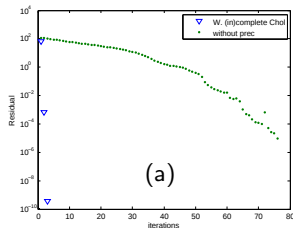
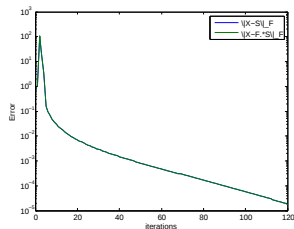
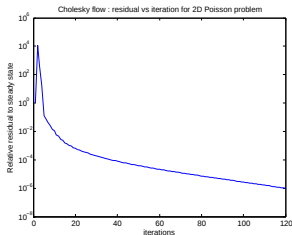
$$\begin{cases} \frac{dQ}{dt} = \mathcal{G} * (P^{-1}(A - PQ)), & t > 0 \\ Q(0) = Q_0 \end{cases}$$

avec $\mathcal{F}$ et $\mathcal{G}$ resp. a filtres triang. supérieur resp. inférieur.

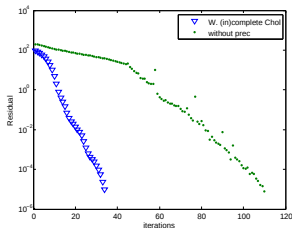
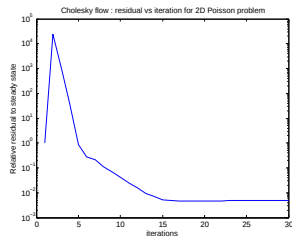
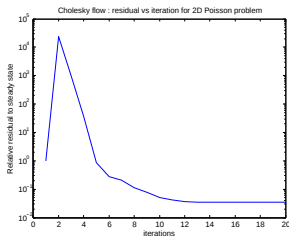
Flot triang. sup pour P et flot triang. inf pour Q .

Euler explicite avec $\Delta t \simeq 0.8$, ça marche !!

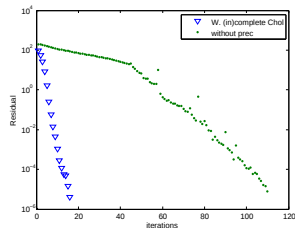
Flot de Cholesky / Pb de Poisson 2D

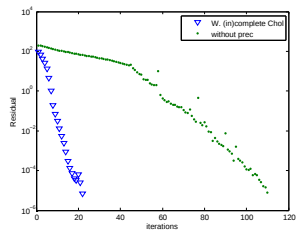
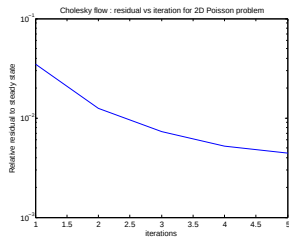


Flot de Cholesky / Pb de Poisson 2D

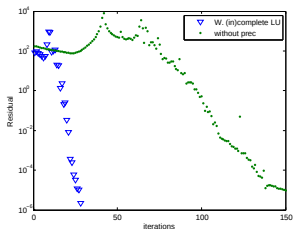
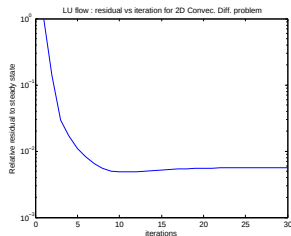
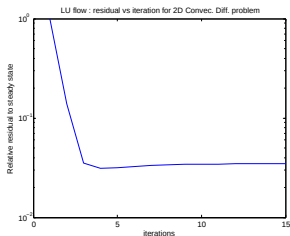


(c)

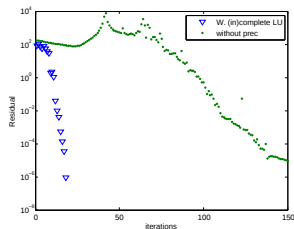




Flot LU / Pb convection diffusion $-\Delta u + 20u_x + 10u_y = f$



(a)



Cette approche s'applique

- ▶ au calcul de factorisations incomplètes creuses LU (Cholesky)
- ▶ enrichissement d'une factorisation creuse donnée (e.g. par ajout de diagonales)
- ▶ Préconditionneurs variables

III. Méthodes de descente (C- Laminie 2004)

Résoudre $Au = b$ par $u^{k+1} = u^k + \alpha_k z^k$,

SYSTÈME DIFF. ASSOCIÉ

$$\begin{pmatrix} \frac{du}{dt} \\ \frac{dz}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B & C \\ D & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ z \end{pmatrix}.$$

Choix de B, C, D, E ?

Si $\frac{dz}{dt} = 0$, alors $z = -E^{-1}Dr$ et

$$\frac{dr}{dt} = -A(B - CE^{-1}D)r,$$

Ainsi $S = B - CE^{-1}D$ complément de Schur et precond. inverse de A

Exemple: $B = 0$, $C = -D = Id$ et $E = A$.

Rmq : si $\frac{dz}{dt} = 0$



$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = Br + Cz, \\ z = -E^{-1}Dr \leftarrow \text{control feedback} \end{cases}$$

- ▶ Si $S = A^{-1}$, $Dr + Ez = 0$: projection ; préconditionnement (aussi dans le cas non linéaire) → **Auto preconditionnement**
- ▶ Dans un schéma numérique, la précision avec laquelle $Dr + Ez = 0$ est résolue caractérise le preconditionnement.

On part de

$$\begin{cases} \frac{dQ}{dt} = \tilde{Q} (Id - AQ) \\ \frac{d\bar{Q}}{dt} = \bar{Q} (Id - A\bar{Q}) \\ Q(0) = Q_0, \tilde{Q}(0) = \tilde{Q}_0. \end{cases}$$

Soit $u(t) = Q(t)b$, $r(t) = b - Au(t)$ et $z = \tilde{Q}r$. On a

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = z, \\ \frac{dz}{dt} = -\tilde{Q}Az + \bar{Q}(r - Az). \end{cases} \quad \text{d'où} \quad \begin{cases} \frac{dr}{dt} = -Az, \\ \frac{dz}{dt} = -\tilde{Q}Az + \bar{Q}(r - Az). \end{cases}$$

RESULTATS

Stabilité asymptotique pour les choix de $\tilde{Q}$ et $\bar{Q}$ (quand A est DP)
Versions continues de CG, Bicgstab

On retrouve CG ...

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = z, \\ z = r - \alpha(t)z. \end{cases}$$

... et Bicgstab

$$\begin{cases} \frac{dr}{dt} &= -\mathbf{P}(s + q), \\ q &= r + \omega_0(Id - \alpha\mathbf{P})q, \\ s &= r - \omega\mathbf{P}q. \end{cases}$$

Résolution en temps fini : méthode de tir

Idée atteindre $r = 0$ en temps fini

$$\begin{pmatrix} \frac{du}{dt} \\ \frac{dz}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ z \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} r \\ z \end{pmatrix}.$$

Soit $I = [0, T]$. Le problème : calculer z_0 tel que $r(T) = 0$.

Définit la fonction flot $\mathcal{F} : z(0) \mapsto r(T)$.

Méthode de tir : calculer numériquement une racine de $\mathcal{F}$

Mise en œuvre

- ▶ Construction de $\mathcal{F}_N \approx \mathcal{F}$ par intégration numérique jusqu'à $t = T$
- ▶ Résolution de $\mathcal{F}_N(z(0)) = 0$ par une méthode d'optimisation

IV. Variations sur la méthode de Cauchy (C 2005)

$$\begin{cases} \frac{dU}{dt} = F(U), \\ U(0) = U_0, \end{cases}$$

MÉTHODE À P PAS

Calcul de la sol. Stat (stable) ($F(U) = 0$) par la méthode à p pas

Soit X_0

Pour $k=0, \dots$

Poser $K_1 = F(X^k)$

pour $m=2, \dots, p$

poser $K_m = F(x^k + \Delta t_k K_{m-1})$

poser $X^{k+1} = X^k + \Delta t_k \sum_{i=1}^p \alpha_i K_i$

Ici $\sum_{i=1}^p \alpha_i = 1$, Δt_k et les α_i sont calculés pour minimiser

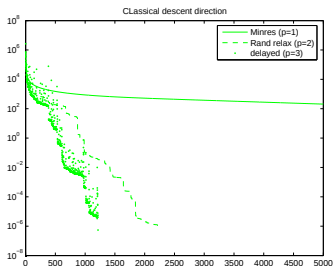
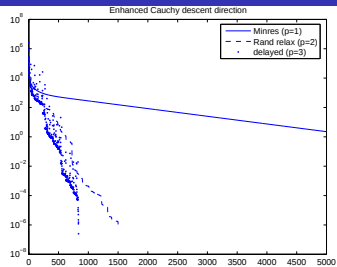
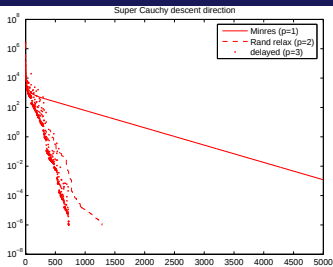
$$\|F(X^{k+1})\|_2.$$

- ▶ s'applique à la résolution de pb linéaires comme non linéaires mais la convergence est lente
- ▶ Peut être utilisé comme préconditionneur

ACCELERATIONS DE LA MÉTHODE DE CAUCHY (RAYDAN-SVAITER)

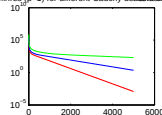
- ▶ Aléatoirement : remplacer Δt_k par $\theta_k \Delta t_k$ avec $\theta_k \sim [0, 2]$.
- ▶ Retardé : remplacer Δt_k par Δt_{k-1} .

Appliquer ces procédures aux méthodes de Cauchy généralisées pour $p = 1, 2, 3$.

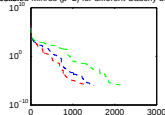


(c)

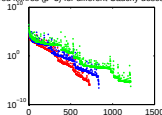
Minres ($p=1$) for different Cauchy descent directions



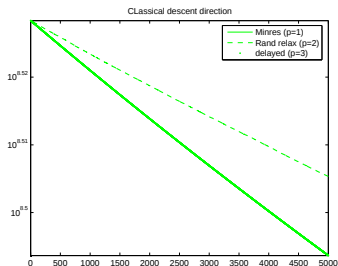
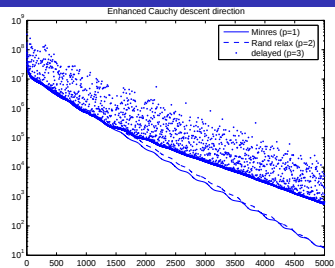
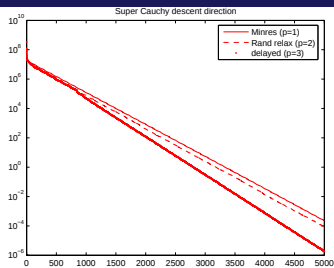
Minres ($p=2$) for different Cauchy descent directions



Delayed Minres ($p=3$) for different Cauchy descent direction

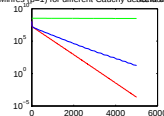


(d)

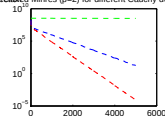


(e)

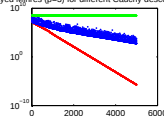
Minres ($p=1$) for different Cauchy descent directions



Minres ($p=2$) for different Cauchy descent direction



Delayed Minres ($p=3$) for different Cauchy descent direction



(f)

V. Variations sur la méthode de Newton (C-Raydan 2004 / 2007)

OBTENTION DU SYSTÈME (C. RAYDAN)

Flot de Newton $\frac{dx}{dt} = -(\nabla F(x))^{-1}F(x)$

Flot de Newton couplé $\frac{dx}{dt} = -z$
 $(\nabla F(x))z = F(x)$

Flot de Newton relaxé $\frac{dx}{dt} = -z$
 $\epsilon \frac{dz}{dt} = F(x) - \nabla F(x)z$

THÉORÈME

Si F est $\mathcal{C}^2$ dans un vois. de la solution x^ of $F(x) = 0$, alors $(x^*, 0)$ est asymptiquement stable $\forall \epsilon > 0$.*

1- W opt. méthode 1

calculer z^k approx. de
l'état stationnaire de

$$\epsilon \frac{dz}{dt} = F(x^k) - \frac{F(x^k + \tau z) - F(x^k)}{\tau}$$

$$z(0) = z^{k-1}.$$

2- W opt. méthode 2

calculer x^{k+1} depuis x^k par $x^{k+1} = x^k + \alpha_k z_k$

Étape 1- avec minimisation du type Cauchy

Étape 2 - avec la méthode spectrale globalisée (Raydan) calculer x^{k+1}
depuis x^k

APPLICATIONS

- ▶ racine carrée d'une matrice SDP + pbs. classiques en opt :
Rosenbrock 1, Oren's power, Strictly convex 2 4 Broyden tridiagonal
- ▶ Résolution de Navier Stokes 2D incompressible Stat. (variables
primitives, formulation courant-vorticité $\omega - \psi$).

Approximations creuses de solutions de fonctions de matrices) C-2007

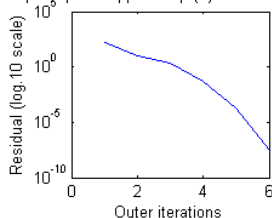
Let $\mathcal{F}$ be a filter matrix, we set formally

$$\frac{dx}{dt} = -\mathcal{F} \cdot * z, \quad (1)$$

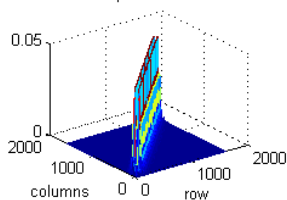
$$\epsilon \frac{dz}{dt} = (\mathcal{F} \cdot * F(x)) - \nabla(\mathcal{F} \cdot * F(x))z. \quad (2)$$

It must be noted that the sparsity pattern is conserved in the discrete system by replacing F by $\mathcal{F} \cdot * F$.

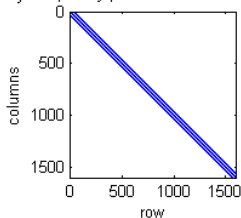
Comput. sparse approx. sqrt(A) - Converg. history



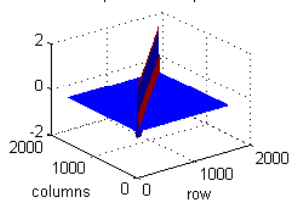
Mesh plot of the error

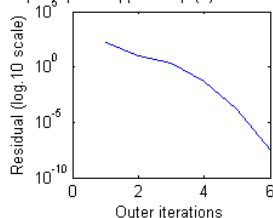


Sparsity pattern of matrix filter

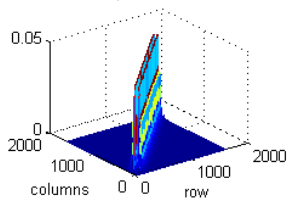


Mesh plot of the Sqrt of A

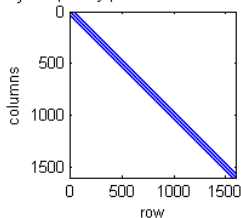


Comput. sparse approx. $\sqrt{\text{A}}$ - Converg. history

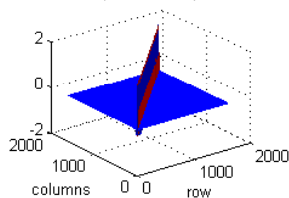
Mesh plot of the error

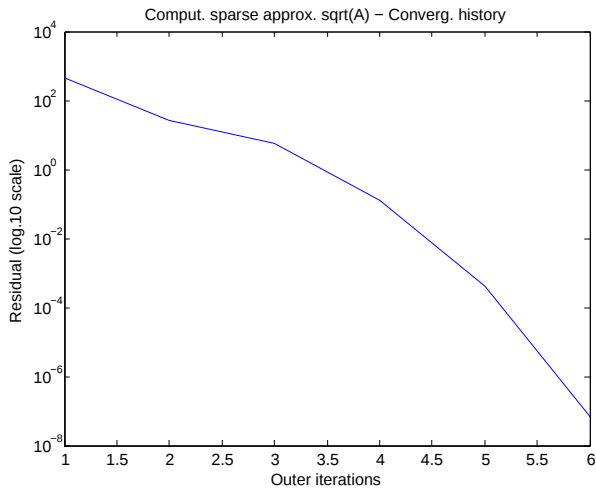


Sparsity pattern of matrix filter



Mesh plot of the Sqrt of A





Equations de Navier-Stokes (2D) C-Raydan, ETNA 2009

Variables primales

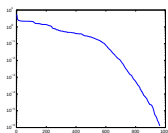
 $\mathbf{u} = (u, v)$: vitesse, p : pression, $\Omega =]0, 1[^2$

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p &= 0 & \Omega \\
 \operatorname{div} \mathbf{u} &= 0 & \Omega, \\
 u &= g_1, v = g_2 & \partial\Omega
 \end{aligned}$$

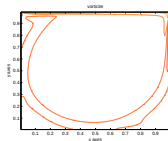
Formulation fonction de courant-vorticité

$$\omega = \operatorname{curl} \mathbf{u}, \quad u = -\frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

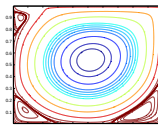
$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{Re} \Delta \omega + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \omega}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \omega}{\partial y} &= 0 & \Omega \\
 \Delta \psi &= \omega & \Omega
 \end{aligned}$$



(a)

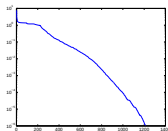


(b)

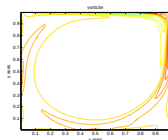


(c)

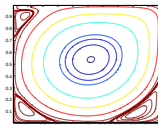
FIGURE: Driven Cavity $\omega - \psi$. $\text{Re}=3200$, $N = 255$



(a)



(b)



(c)

FIGURE: Reg. Lid driven Cavity $\omega - \psi$, $\text{Re}=5000$, $N = 255$

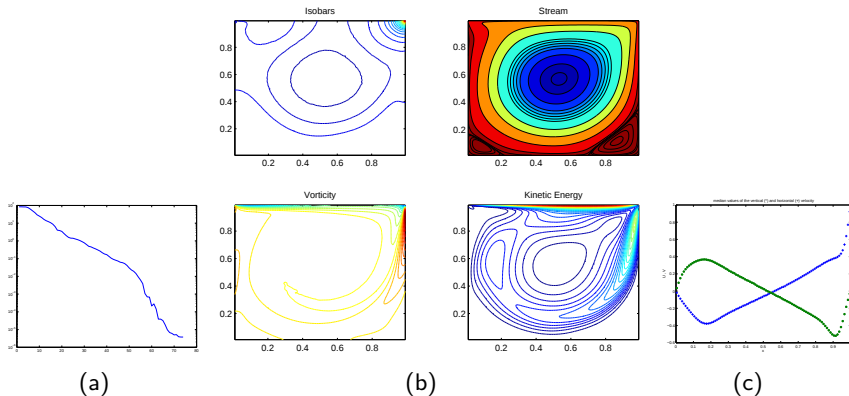


FIGURE: Lid driven cavity (U, V, P) . $Re=1000$, $N = 127$

V. Conclusion et perspectives

- ▶ Simplicité de l'approche
- ▶ Une façon de construire et d'étudier les méthodes d'algèbre linéaire sans assommer l'auditoire avec les méthodes de Krylov
- ▶ On peut utiliser d'autres techniques (méthodes de tir C-Laminie)
- ▶ Préconditionneurs adaptatifs, "creusitude" variable
- ▶ Calcul de fonctions de matrices en parallèle (Schémas pararéels)