



HAL
open science

Approximation parallèle de l'exponentielle de matrices hermitiennes

Frédéric Hecht, Sidi-Mahmoud Kaber

► **To cite this version:**

Frédéric Hecht, Sidi-Mahmoud Kaber. Approximation parallèle de l'exponentielle de matrices hermitiennes. 2021. hal-03197415

HAL Id: hal-03197415

<https://hal.sorbonne-universite.fr/hal-03197415>

Preprint submitted on 13 Apr 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Approximation parallèle de l'exponentielle de matrices hermitiennes

F. Hecht, S.-M. Kaber
Sorbonne Université,
Université de Paris, CNRS,
Laboratoire Jacques-Louis Lions,
LJLL, F-75005 Paris, France

13 avril 2021

Résumé

On s'intéresse à l'approximation de la fonction exponentielle sur un intervalle réel par une fonction rationnelle particulière (inverse d'un polynôme). Exploitant la décomposition en fractions simples de cette fonction rationnelle, on construit un algorithme de calcul de l'exponentielle d'une matrice et adapté au calcul parallèle. Les performances de cet algorithme en précision et en temps de calcul sont analysées.

Mots clés : exponentielle de matrice, calcul parallèle.

1 Introduction

On retrouve l'équation différentielle $u'(t) = Au(t)$ dans de nombreuses modélisations de problèmes physiques. Si elle n'apparaît pas précisément sous cette forme, cette équation intervient comme "brique de base" dans un système différentiel plus compliqué. Pour résoudre avec une grande précision cette équation, il est essentiel de disposer d'un algorithme de calcul de l'exponentielle d'une matrice. Cet algorithme doit être efficace, tant pour la précision que pour le temps de calcul. Il existe de nombreux algorithmes de calcul de l'exponentielle d'une matrice. Nous renvoyons le lecteur au célèbre article de Moler et Van Loan [9] pour une comparaison de ces méthodes. Aucune n'est nettement plus efficace que les autres si on tient compte de plusieurs critères importants comme la précision, la durée du temps de calcul, l'occupation en place mémoire, la complexité, la variétés des matrices auxquelles la méthode peut être appliquée, etc.

La méthode que nous proposons est proche de celle définie dans [4] ou [1], en ce sens que d'une part, elle concerne plus le calcul de vecteurs de la forme $\exp(A)v$ que de la matrice $\exp(A)$ elle-même. Et que d'autre part, qu'elle a pour objectif la mise au point d'algorithmes de calcul adaptés au calcul parallèle. L'algorithme de [4] est basé sur le calcul de l'exponentielle d'une matrice de Heisenberg de dimension m , plus petite que la dimension n de la matrice A . Cette matrice est obtenue à la m -ième étape de l'algorithme d'Arnoldi. Citons aussi la méthode proposée dans [7] qui utilise une factorisation de la matrice A . Nous présentons dans ce travail une méthode basée sur une idée simple et ancienne dont nous montrons qu'elle est particulièrement bien adaptée au calcul parallèle de solutions d'équations différentielles. Supposons disposer d'une approximation \mathcal{R}_n de la fonction exponentielle complexe et que cette approximation, qui dépend d'un paramètre $n \geq 1$, soit très précise dans une région Λ du plan complexe : il existe une suite $(\varepsilon_n)_n > 0$ tendant rapidement vers 0 et telle que pour tout $z \in \Lambda$ et tout $n \geq 1$,

$$|\mathcal{R}_n(z) - \exp(z)| \leq \varepsilon_n.$$

L'approximation s'étend naturellement aux exponentielles des matrices diagonales en posant :

$$\mathcal{R}_n(\text{diag}(d_i)_i) = (\text{diag}(\mathcal{R}_n(d_i))_i).$$

Supposons pouvoir l'étendre aux matrices carrées quelconques et que pour toute matrice $A \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$ et toute matrice inversible $P \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$, on a

$$\mathcal{R}_n(PAP^{-1}) = P\mathcal{R}_n(A)P^{-1}.$$

L'erreur d'approximation pour une matrice diagonalisable $A = PDP^{-1}$ peut alors être contrôlée comme suit

$$\|\exp(A) - \mathcal{R}_n(A)\| \leq \kappa(P) \|\exp(D) - \mathcal{R}_n(D)\|,$$

en notant $\kappa(P) = \|P\| \|P^{-1}\|$ le conditionnement de la matrice de passage P dans la norme matricielle considérée. En particulier, pour la norme matricielle associée à la norme vectorielle 2, on a

$$\|\exp(A) - \mathcal{R}_n(A)\|_2 \leq \kappa_2(P) \max_{\lambda_i \in Sp(A)} |e^{\lambda_i} - \mathcal{R}_n(\lambda_i)|.$$

On en déduit que si le spectre de A est inclus dans Λ , on a

$$\|\exp(A) - \mathcal{R}_n(A)\|_2 \leq \kappa_2(P) \max_{z \in \Lambda} |\exp(z) - \mathcal{R}_n(z)|.$$

Ce qui ramène l'étude à l'approximation de la fonction exponentielle scalaire dans le plan complexe. On retient donc que, de l'estimation d'erreur dans le plan complexe

$$\max_{z \in \Lambda \subset \mathbb{C}} |\exp(z) - \mathcal{R}_n(z)| \leq \varepsilon_n,$$

on déduit que, pour toute matrice diagonalisable dont le spectre est inclus dans Λ , on a

$$\|\exp(A) - \mathcal{R}_n(A)\|_2 \leq \varepsilon_n \kappa_2(P). \quad (1)$$

Si, de plus la matrice est normale, la matrice P est une matrice unitaire et l'estimation d'erreur devient :

$$\|\exp(A) - \mathcal{R}_n(A)\|_2 \leq \varepsilon_n.$$

C'est le cas des matrices hermitiennes, mais aussi des matrices anti-hermitiennes. Noter cependant que pour une matrice quelconque, le terme $\kappa_2(P)$ peut-être trop grand et dégrader sérieusement la majoration (1). Intéressés par les matrices provenant de la discrétisation du Laplacien, nous ne considérons dans ce travail que les matrices hermitiennes. L'article est organisé comme suit. La section 2 est consacrée à l'approximation de la fonction exponentielle scalaire. Cette approximation $\mathcal{R}_n(z)$ est une fonction rationnelle dont les pôles sont tous simples. Dans la section 3, on présente l'approximation de l'exponentielle d'une matrice. Cette approximation est basée sur une décomposition en éléments simples permettant une parallélisation naturelle et efficace du calcul de $\mathcal{R}_n(A)$. Chacune des sections contient des tests numériques. La dernière section est consacrée à l'exposé de perspectives de travail en vue de l'analyse complète de la méthode.

2 Cas scalaire

Pour $n \in \mathbb{N}^*$ fixé, on note \exp_n la série tronquée à l'ordre n de l'exponentielle. Pour tout $z \in \mathbb{C}$, on a

$$\exp_n(z) = \sum_{k=0}^n \frac{1}{k!} z^k$$

et $\lim_{n \rightarrow +\infty} \exp_n(z) = \exp(z)$. On montre que $\exp_n(x)$ (quand \exp_n est vue comme fonction de \mathbb{R} dans \mathbb{R}) est toujours positif pour n pair. Comme $\exp'_n = \exp_{n-1}$, on en déduit que \exp_n est strictement croissante pour n impair et strictement convexe pour n pair.

2.1 Zéros de la série tronquée de l'exponentielle

On note $\theta_i^{(n)}$ les n zéros de \exp_n . Si n est pair, les zéros sont des complexes conjugués deux à deux et aucun n'est un nombre réel. Si n est impair, il existe une et une seule racine réelle de \exp_n , les autres sont conjuguées. Quelques zéros de \exp_n sont représentés sur la figure 1 (à gauche). On voit que le module des zéros augmente avec n , ce qui est normal. Étant donnée la régularité de la fonction exponentielle sur tout le plan complexe, les zéros de \exp_n doivent tendre vers l'infini avec n . Cependant, cette croissance est modérée puisque (voir [14], par exemple)

$$1 \leq |\theta_k^{(n)}| \leq n.$$

G. Szegöe a montré dans [12] que les zéros “normalisés”, *i.e.*, les zéros de $\exp_n(nz)$, se

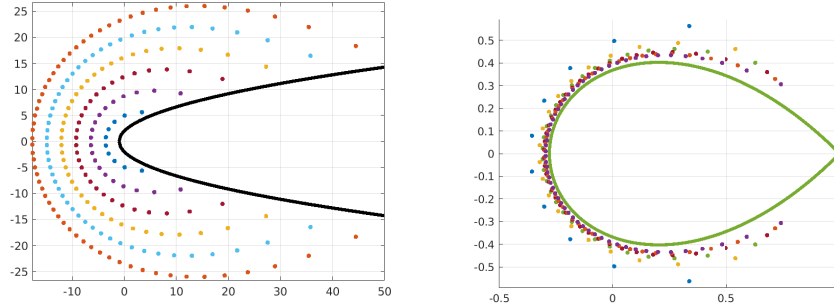


FIGURE 1 – Pour $n = 10, 20, 30, 40, 50, 60$, les zéros de \exp_n et la parabole $y^2 = 4(x + 1)$ (à gauche), les zéros de $z \mapsto \exp_n(nz)$ et la courbe de Szegöe (à droite).

rapprochent, quand $n \rightarrow \infty$, de la courbe, appelée courbe de Szegöe, définie par

$$\{z \in \mathbb{C}, \quad |ze^{1-z}| = 1, \quad |z| \leq 1\}.$$

Les zéros normalisés et la courbe de Szegöe sont présentés figure 1 (à droite). Par ailleurs, il est intéressant de se demander s’il existe une partie du plan complexe ne contenant aucun zéro. La réponse est oui; l’intérieur de la parabole d’équation $y^2 = 4(x + 1)$, qui englobe donc le demi-axe réel positif, ne contient aucun zéro. Ce résultat surprenant a été démontré par Saff et Varga dans [11].

2.2 Approximation de la fonction exponentielle

On propose l’approximation suivante de la fonction exponentielle définie pour tout nombre complexe z par

$$\exp(z) \simeq \mathcal{R}_n(z) := \frac{1}{\exp_n(-z)}.$$

Cette approximation est justifiée par l’observation évidente que

$$\exp(z) = \frac{1}{e^{-z}} \simeq \frac{1}{\exp_n(-z)}.$$

Noter que $\mathcal{R}_n(0) = 1$ et que \mathcal{R}_n n’a pas de pôles réels si n est pair, ce que nous supposons toujours. D’autre part, \mathcal{R}_n n’a pas de pôles proches du demi-axe des réels négatifs, voir parabole de la figure 1. Ce qui ouvre la voie à une bonne approximation de l’exponentielle sur ce demi-axe.

Remarque 1 La fonction rationnelle $\mathcal{R}_n(z)$ est l'approximant de Padé d'indice $(0, n)$ de la fonction exponentielle. Son développement de Taylor à l'origine coïncide donc avec celui de cette fonction jusqu'à l'ordre n :

$$\mathcal{R}_n^{(j)}(0) = 1, \quad 0 \leq j \leq n. \quad (2)$$

On peut donc écrire le développement en série entière

$$\mathcal{R}_n(z) = \exp_n(z) + \sum_{k=n+1}^{+\infty} \lambda_k z^k.$$

La fonction rationnelle \mathcal{R}_n peut être décomposée en éléments simples.

Proposition 1 On a, pour tout $z \in \mathbb{C}$

$$\mathcal{R}_n(z) = \sum_{k=1}^n \frac{a_k}{z + \theta_k}, \quad (3)$$

où les $\theta_k \equiv \theta_k^{(n)}$ sont les zéros de \exp_n et

$$a_k = -\frac{n!}{\prod_{j \neq k} (\theta_k - \theta_j)}. \quad (4)$$

Exemple. Pour $n = 2$, on a $\theta_1 = -1+i$, $\theta_2 = -1-i$, $a_1 = i$, $a_2 = -i$ et l'approximation est

$$\exp(x) \simeq \mathcal{R}_2(x) = \frac{1}{\exp_2(-x)} = \frac{1}{1 - x + \frac{1}{2}x^2} = \frac{i}{x - 1 + i} - \frac{i}{x - 1 - i}.$$

On présente sur les figures 2 et 3 la fonction exponentielle et ses approximations po-

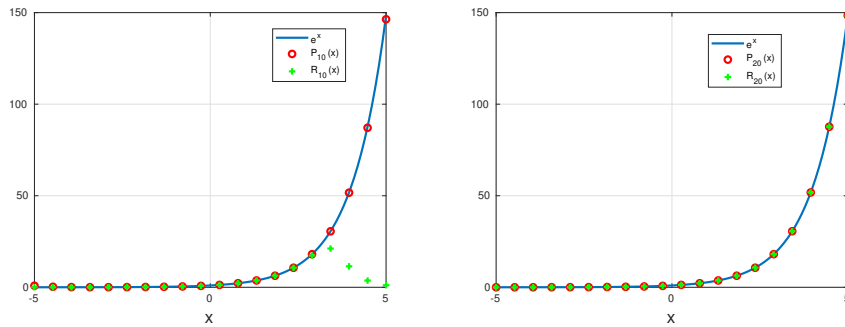


FIGURE 2 – La fonction exponentielle et ses approximations polynomiales et rationnelles \exp_n et \mathcal{R}_n sur $[-5, 5]$, pour $n = 10$ (à gauche) et $n = 20$ (à droite).

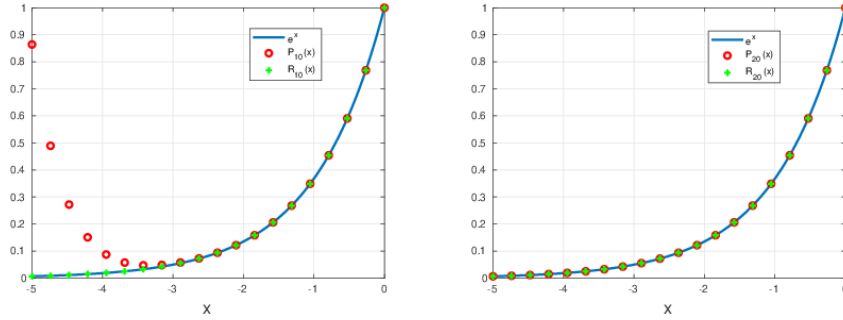


FIGURE 3 – La fonction exponentielle et ses approximations polynomiales et rationnelles \exp_n et \mathcal{R}_n sur $[-5, 0]$, pour $n = 10$ (à gauche) et $n = 20$ (à droite).

polynomiales et rationnelles sur les intervalles $[-5, 5]$ et $[-5, 0]$. Pour $n = 10$, l'approximation rationnelle est nettement plus précise pour les réels négatifs. À l'opposé, l'approximation polynomiale est meilleure pour les réels positifs. Pour $n = 20$, les deux approximations semblent bien s'ajuster à la fonction exponentielle.

Il ne faut pas s'alarmer de la définition des coefficients a_k par la relation (4) dont le dénominateur est un produit de différences $\theta_k - \theta_j$ car l'écart entre deux zéros de \exp_n est minoré indépendamment de n (voir [14], Theorem 4)

$$\inf_{n \geq 2} \min_{j \neq k} |\theta_j^{(n)} - \theta_k^{(n)}| \geq 0.29 \dots$$

empêchant ainsi de diviser par des nombres trop petits dans (4). Par ailleurs, on peut exprimer autrement les coefficients a_k

$$a_k = \frac{(-1)^n}{\exp'_n(\theta_k)} = \frac{(-1)^n}{\exp_{n-1}(\theta_k)},$$

et on peut les regrouper en paires de nombres complexes conjugués. La figure 4 représente les coefficients a_k pour $n = 6, 8$ et 10 . Ils semblent modérés, en ce sens que leur module augmente raisonnablement avec n en comparaison avec les coefficients de l'approximation étudiée dans [6] et [5]. Ce qui est un gage de stabilité numérique.

2.3 Erreur d'approximation

L'approximation rationnelle d'une fonction réelle ou complexe est un problème bien documenté : existence d'une meilleure approximation, unicité, calcul, ... Voir, par exemple, [8]. Deux problèmes se posent.

1. Déterminer des parties Λ du plan complexe où l'approximation $\mathcal{R}_n(z) \simeq \exp(z)$ converge :

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} |\mathcal{R}_n(z) - \exp(z)| = 0, \quad (\forall z \in \Lambda).$$

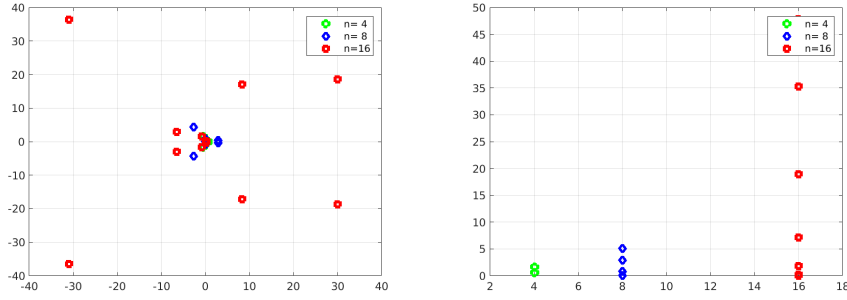


FIGURE 4 – Les coefficients a_k dans le plan complexe (à gauche) et leur module (à droite), $n \in \{4, 8, 16\}$.

Il est évident qu'il faut exclure des voisinages des pôles de \mathcal{R}_n

2. Déterminer des parties du plan complexe où l'approximation est très précise, *i.e.* l'erreur $|\mathcal{R}_n(z) - \exp(z)|$ tend rapidement vers 0 quand n tend vers l'infini, par exemple de façon géométrique.

Convergence sur un intervalle borné. Pour la fonction exponentielle, on peut prouver une décroissance remarquable de l'erreur. Notons $\mathbb{P}_{m,n}([-1, 1])$ l'ensemble des fonctions rationnelles définies sur $[-1, 1]$, dont le numérateur est de degré m (au plus) et le dénominateur est de degré n (au plus) et

$$E_{m,n}(\exp, [-1, 1]) = \min_{r \in \mathbb{P}_{m,n}([-1,1])} \max_{x \in [-1,1]} |\exp(x) - r(x)|,$$

l'erreur de meilleure approximation uniforme sur $[-1, 1]$ de la fonction exponentielle par des éléments de $\mathbb{P}_{m,n}([-1, 1])$. On montre dans [2] que

$$E_{m,n}(\exp, [-1, 1]) \underset{n+m \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{n!m!}{2^{n+m}(n+m)!(n+m+1)!}.$$

Nous ne nous intéressons dans ce travail qu'à l'approximation dans $\mathbb{P}_{0,n}$ pour laquelle, on a donc

$$E_{0,n}(\exp, [-1, 1]) \underset{n \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{1}{2^n(n+1)!}.$$

Cette belle décroissance n'est cependant valide que sur un intervalle borné de \mathbb{R} . Ce qui n'est pas toujours le cas dans les applications qui ont motivé notre étude.

Convergence sur $]-\infty, 0]$. Ce cas est traité dans le travail pionnier de [3] où on approche $\exp(-x)$ pour les valeurs positives de x . Les auteurs montrent que l'erreur de meilleure approximation $E_{0,n}(\exp(-\cdot),]-\infty, 0])$ décroît géométriquement et exhibent

une fonction particulière, qui se trouve être notre approximation rationnelle, pour laquelle une décroissance est géométrique est démontrée : pour tout $x \geq 0$, on a

$$\left| \frac{1}{\exp_n(x)} - \exp(-x) \right| \leq \frac{1}{2^n}. \quad (5)$$

Sans être aussi précise rapide que la convergence de l'erreur de meilleure approximation sur l'intervalle $[-1, 1]$, la convergence est largement suffisante dans les applications pratiques. Nous renvoyons à [13] pour une présentation des différentes estimations de l'erreur de meilleure approximation. Nous nous contenterons ici de (5), qui fournit immédiatement une majoration d'erreur pour notre approximation rationnelle.

Proposition 2 [3] *On a pour tout réel $x \leq 0$*

$$|\mathcal{R}_n(x) - \exp(x)| \leq \frac{1}{2^n}. \quad (6)$$

La convergence est donc très rapide sur la demi-droite des réels négatifs comme on peut le constater sur les courbes en figure 5.

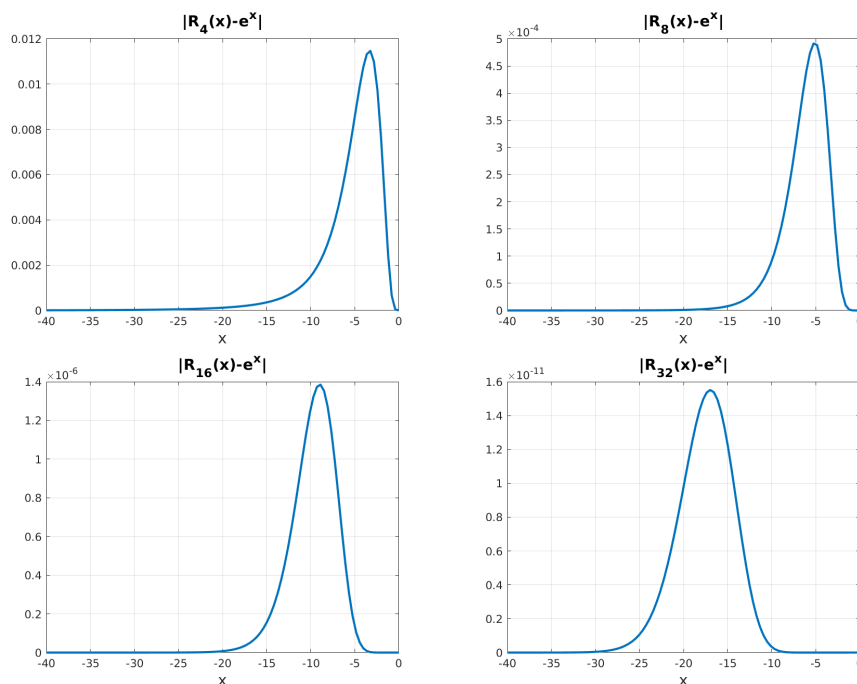


FIGURE 5 – Logarithme de l'erreur $|\mathcal{R}_n(x) - \exp(x)|$ pour $n \in \{4, 8, 16, 32\}$.

Les 6 et 7 montrent des iso-courbes du module de l'erreur pour $n = 32$ ainsi que les points $-\theta_k$. Les iso-valeurs présentés sont les 10^{-k} pour $k = 0, \dots, 13$. On y observe la décroissance rapide de l'approximation le long du demi-axe réel. On observe aussi une

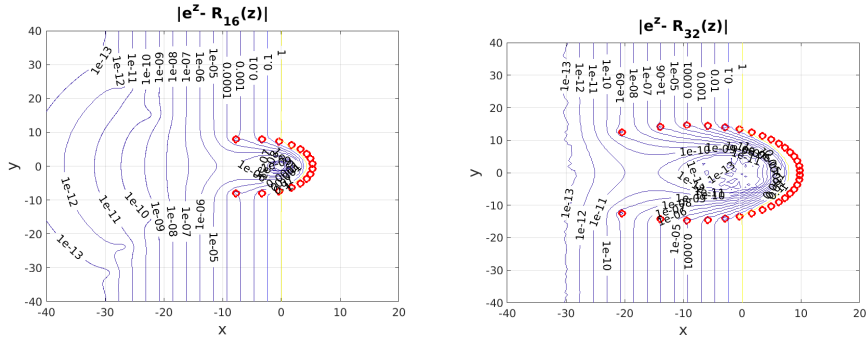


FIGURE 6 – Module de l'erreur $\mathcal{R}_n(z) - \exp(z)$ et zéros de \exp_n pour $n = 16$ (à gauche) et $n = 32$ (à droite)

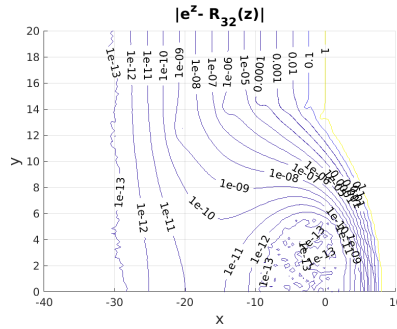


FIGURE 7 – Module de l'erreur $\mathcal{R}_n(z) - \exp(z)$ pour $n = 32$, zoom de la figure précédente.

décroissance remarquable dans tout le demi-plan gauche. On savait par la Proposition 1 que $\mathcal{R}_n(z)$ est une approximation d'ordre n de $\exp(z)$ au voisinage de l'origine. Dans tout le plan complexe du plan, on a [10]

$$\mathcal{R}_n(z) - \exp(z) = \frac{(-1)^n}{(n+1)!} z^{n+1} e^{2z} (1 + o(1))$$

et donc, pour n grand, le terme dominant dans l'erreur d'approximation est majoré en module par

$$\frac{|z|^{n+1}}{(n+1)!} e^{2\operatorname{Re}(z)}.$$

3 Approximation de l'exponentielle d'une matrice

Soit A une matrice carrée de $\mathcal{M}_d(\mathbb{C})$. On suppose que les matrices $A - \theta_k I$ sont inversibles, c'est-à-dire que leurs spectres ne contiennent pas de zéro d'un \exp_n . C'est le cas si la matrice A est hermitienne (on supposera toujours n pair). Et même pour

toute matrice pourvu que n soit assez grand. Nous proposons l'approximation suivante de l'exponentielle de A

$$\exp(A) \simeq \mathcal{R}_n(A) := \sum_{k=1}^n a_k (A + \theta_k I)^{-1}. \quad (7)$$

Remarque 2 Noter que $\mathcal{R}_n(0) = I$ et que si la matrice $D \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$ est diagonale, la matrice $\mathcal{R}_n(D)$ l'est aussi et

$$(\mathcal{R}_n(D))_{i,i} = \sum_{k=1}^n \frac{a_k}{D_{i,i} + \theta_k}.$$

D'autre part, pour toute matrice inversible $P \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$, on a

$$\mathcal{R}_n(PAP^{-1}) = P\mathcal{R}_n(A)P^{-1}.$$

Exemples Pour $n = 1$, on obtient l'approximation $\exp(A) \simeq \mathcal{R}_1(A) = (I - A)^{-1}$ et pour $n = 2$, l'approximation

$$\exp(A) \simeq \mathcal{R}_2(A) = (I - A + \frac{1}{2}A^2)^{-1} = i(A + (-1 + i)I)^{-1} - i(A + (-1 - i)I)^{-1}.$$

Nous n'allons considérer dans ce travail que des matrices hermitiennes. Si le spectre d'une matrice hermitienne est inclus dans l'intervalle $I \subset \mathbb{R}$, on a alors

$$\|\exp(A) - \mathcal{R}_n(A)\|_2 \leq \varepsilon,$$

dès que

$$\max_{x \in I} |\exp(x) - \mathcal{R}_n(x)| \leq \varepsilon.$$

On doit donc pouvoir transférer la qualité de l'approximation (6) aux matrices hermitiennes semi-définies négatives.

4 Tests

Nous vérifions d'abord la précision de l'approximation. Puis comparons le temps mis pour calculer la matrice $\exp(A)$ et le temps mis pour calculer le vecteur $\exp(A)v$ (où $v \in \mathbb{R}^d$ est un vecteur choisi aléatoirement) avec leurs approximations respectives $\mathcal{R}_n(A)$ et $\mathcal{R}_n(A)v$ en tenant compte du fait que ces calculs peuvent être faits en parallèle. Il suffit de disposer de n processeurs et d'affecter à chaque processeur le calcul d'une matrice inverse $(A + \theta_k I)^{-1}$. Dans tous les calculs, n est à la fois le niveau de troncature dans (3) et le nombre de processeurs utilisés dans le calcul parallèle.

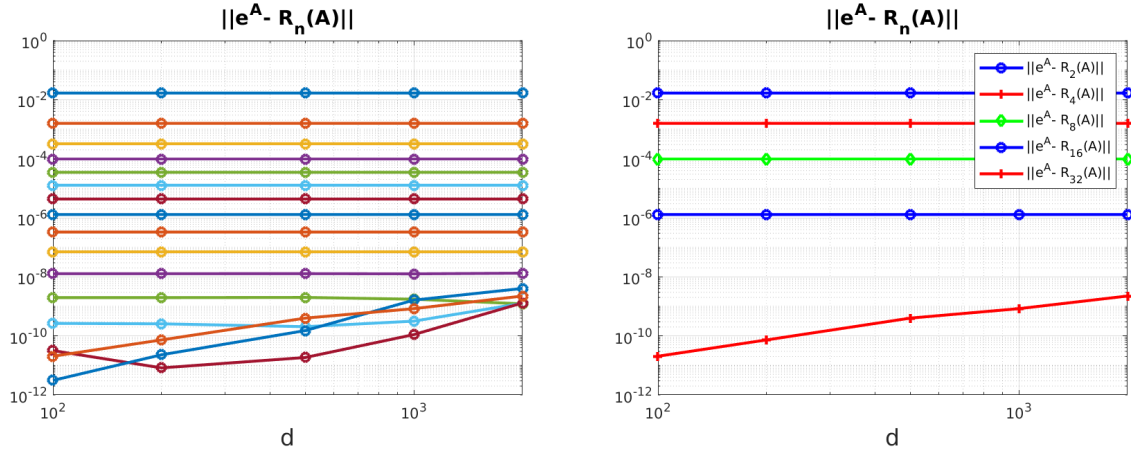


FIGURE 8 – Norme de l’erreur $\exp(A) - \mathcal{R}_n(A)$ en fonction de la dimension d de la matrice A et pour plusieurs valeurs de $n \in \{2, 4, 6, \dots, 32\}$. Échelle log-log.

- **Test 1 : précision.**

La figure 9 montre la norme 2 de l’erreur $\exp(A) - \mathcal{R}_n(A)$ en fonction de la dimension de la matrice A et ce pour plusieurs valeurs de n . La matrice A choisie est l’opposée de la matrice du laplacien $1d$ discrétisé par différences finies, c’est une matrice hermitienne définie négative. Les calculs sont faits avec `Matlab` en utilisant les fonctions `expm` pour calculer $\exp(A)$ et `inv` pour calculer l’inverse des matrices $A + \theta_k I$. On note que l’erreur ne dépend pas de la dimension de la matrice. C’est l’erreur commise par l’approximation rationnelle scalaire sur l’intervalle $[-\varrho(A), 0]$ où $\varrho(A)$ est le rayon spectral de la matrice A , qui augmente avec la dimension. Pour $d = 1000$, on a $\varrho(A) \simeq 4 \cdot 10^6$. L’écart constant entre les courbes montre la décroissance géométrique de l’erreur.

- **Test 2 : calcul de $\exp(A)$.**

On présente figure 10 le temps CPU du calcul de $\exp(A)$ en fonction de la dimension d de la matrice A . Les calculs sont faits avec `Matlab`. Les temps sont mesurés par les fonctions `tic` et `toc`. Le calcul de $\exp(A)$ est réalisé par la fonction `expm`. Le temps de calcul parallèle pris en compte et celui du calcul d’une matrice inverse $(A + \theta_k I)^{-1}$. Le calcul des matrices inverses est effectué par la fonction `inv`. On néglige donc l’étape de sommation (“all reduce step”) nécessaire pour calculer $\mathcal{R}_n(A)$. Pour chaque valeur de la dimension $d \in \{100, 200, 500, 1000, 2000\}$ de la matrice A , on présente plusieurs temps CPU correspondant à diverses valeurs de n . Comme attendu, ce temps ne dépend pas du paramètre de troncature $n \in \{2, 4, 6, \dots, 16\}$, qui est aussi le nombre de processeurs utilisés théoriquement. On n’observe pas de gain CPU, le calcul par la fonction `expm` est plus rapide.

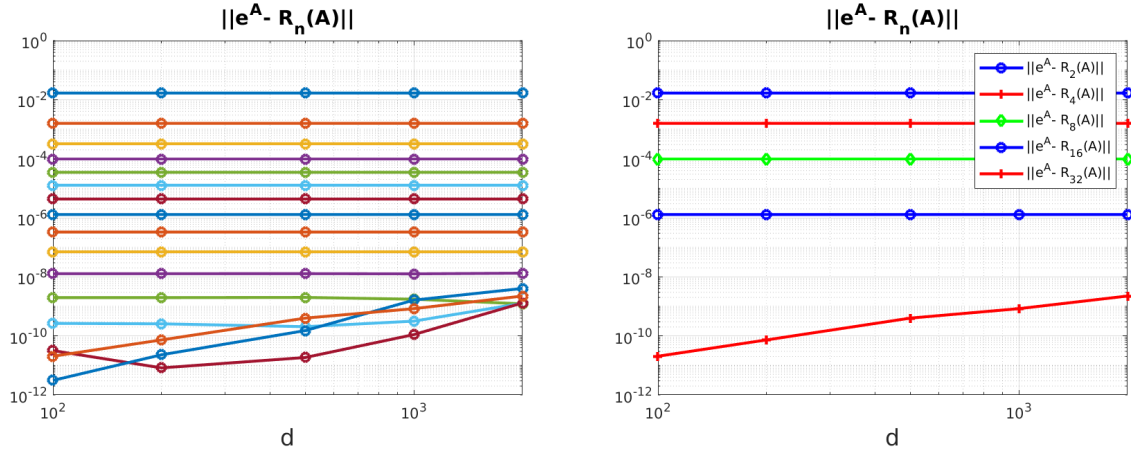


FIGURE 9 – Norme de l'erreur $\exp(A) - \mathcal{R}_n(A)$ en fonction de la dimension d de la matrice A et pour plusieurs valeurs de $n \in \{2, 4, 6, \dots, 32\}$. Échelle log-log.

Remarque 3 Le spectre d'une matrice réelle pouvant être localisé partout dans le plan complexe, on aimerait avoir des décroissances d'erreur aussi rapides que (6) valides dans d'autres régions du plan. Ce problème peut être contourné pour les matrices hermitiennes. Soit A une matrice hermitienne et $c \in \mathbb{R}$ un majorant de son spectre. Le spectre de la matrice $A - cI$ étant négatif, on peut faire l'approximation

$$\exp(A) = e^c \exp(A - cI) \simeq e^c \mathcal{R}_n(A - cI).$$

Le terme e^c pouvant être très grand, l'approximation n'est acceptable que pour des valeurs raisonnables de c .

Remarque 4 Si l'approximation de $\exp(A)$ n'est pas acceptable mais l'approximation de $\exp(A/s)$ est assez précise ($s \in \mathbb{N}^*$), on calculera $\exp(A)$ par

$$\exp(A) \simeq [\mathcal{R}_n(A/s)]^s.$$

• **Test 3 : calcul de $\exp(A)v$.**

On s'intéresse maintenant au temps de calcul de l'opération $\exp(A)v$. On écrit

$$\exp(A)v \simeq \mathcal{R}_n(A)v = \sum_{k=1}^n a_k f_{k,j},$$

où $f_{k,j}$ est la solution du système linéaire

$$(A + \theta_k I)x = v.$$

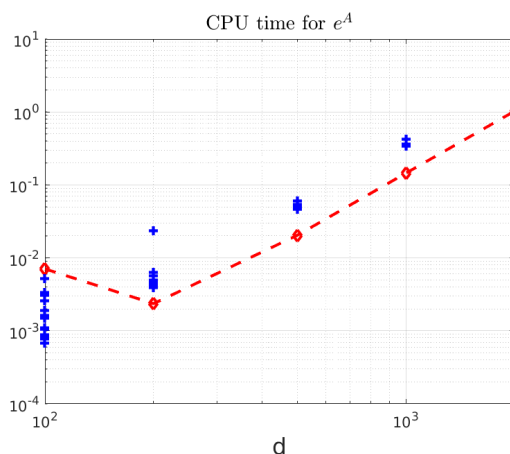


FIGURE 10 – Temps CPU de calcul de $\exp(A)$ par la fonction `expm` (\diamond) et par notre algorithme ($+$) en fonction de la dimension d de la matrice A . Pour chaque valeur de d (dimension de la matrice), on présente plusieurs temps CPU correspondant à diverses valeurs de n (niveau de troncature). Échelle log-log.

On doit donc comparer le temps de calcul de $\exp(A)v$ avec le temps de calcul d'un vecteur $w_k = (A + \theta_k I)^{-1}v$, négligeant encore une fois les communications entre processeurs dans l'étape "all reduce". Le vecteur w_k est calculé en résolvant le système linéaire $(A + \theta_k I)x = v$, par la commande `\` de Matlab. À aucun moment, on ne tient compte de la structure tridiagonale de la matrice considérée. La figure 11 présente le temps CPU des deux calculs. La comparaison est favorable à l'approximation rationnelle. On note qu'augmenter le nombre de processeurs (qui est égal au niveau de troncature n) n'apporte pas plus de gain de temps CPU mais, bien sûr, plus de précision. Le speedup, défini comme le rapport du temps CPU du calcul séquentiel sur le temps CPU du calcul parallèle, est représenté en figure 12. On observe un gain CPU d'autant plus important que la dimension de la matrice est grande : pour une matrice de taille 5000×5000 , le calcul de $\mathcal{R}_n(A)v$ est 9 fois plus rapide que le calcul `expm(A)v` et ce pour toutes les valeurs de n considérées.

5 Conclusion et perspectives

Nous avons présenté une méthode simple pour le calcul de l'exponentielle d'une matrice hermitienne. Cette méthode est basée sur une approximation rationnelle de l'exponentielle complexe. Problème ancien et très documenté. Nous montrons que cette idée, bien qu'ancienne donc, est particulièrement adaptée au calcul parallèle. Les tests montrent un gain substantiel de temps dans le calcul de produits de la forme $\exp(A)v$. La

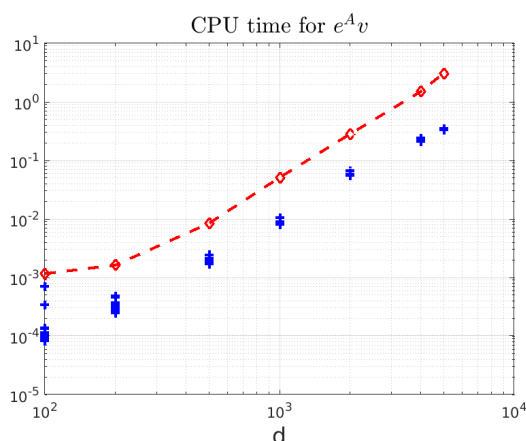


FIGURE 11 – Temps CPU de calcul de $\exp(A)v$ par la fonction expm (\diamond) et par notre algorithme ($+$) en fonction de la dimension d de la matrice A . Le vecteur v est choisi aléatoirement. Pour chaque valeur de d , on présente plusieurs temps CPU correspondant à diverses valeurs de n . Échelle log-log.

méthode offre aussi un avantage en terme d’occupation mémoire car la matrice $\exp(A)$ est pleine et doit être stockée entièrement pour le calcul direct du vecteur $\exp(A)v$. Alors qu’avec notre méthode, il n’est pas nécessaire de stocker les matrices $(A + \theta_k I)^{-1}$ (qui sont pleines) mais uniquement les matrices creuses $A + \theta_k I$. Nous prévoyons d’appliquer l’approximation rationnelle à la résolution numérique d’équations d’évolution du type

$$u'(t) = Au(t) + f(u(t), t)$$

avec une matrice A constante. La solution de cette équation vérifie entre deux instants t_m et t_{m+1}

$$u(t_{m+1}) - \exp((t_{m+1} - t_m)A) u(t_m) = \int_{t_m}^{t_{m+1}} \exp((t_{m+1} - s)A) f(u(s), s) ds.$$

Cette observation conduit naturellement à un schéma numérique où $\exp(\alpha A)$ est approchée par $\mathcal{R}_n(\alpha A)$. Nous prévoyons d’appliquer ce schéma à la résolution numérique, sur ordinateurs à architecture parallèle, d’équations différentielles et plus généralement d’équations aux dérivées partielles. Ce travail est en cours.

Références

- [1] A. H. Al-Mohy, N. J. Higham, *Computing the action of the matrix exponential, with an application to exponential integrators*, SIAM J. Sci. Comput., vol 33, No. 2, (2011).

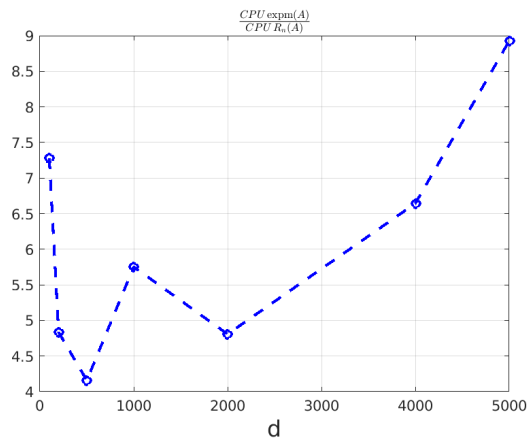


FIGURE 12 – Rapport des temps CPU de calcul de la figure précédente.

- [2] D. Braess, *On the conjecture of Meinardus on rational approximation of $\exp(x)$* , Journal of Approximation Theory, 36 (1982), pp. 317-320.
- [3] W.J. Cody, G. Meinardus, R.S. Varga, *Chebyshev Rational Approximations to $\exp(-x)$ in $[0, +\infty)$ and Applications to Heat-Conduction Problems*. Journal of Approximation Theory, 2 (1969), pp. 50-65.
- [4] E. Gallopoulos, Y. Saad, *Efficient Parallel Solution Of Parabolic Equations : Implicit Methods On The Cedar Multicuster*, Fourth SIAM Conf. Parallel Processing for Scientific Computing, J. Dongarra, P. Messina, D. C. Sorensen, and R. G. Voigt, eds., SIAM, 1990, pp. 251–256. Chicago, Dec. 1989.
- [5] F. Hecht, S.M. Kaber, *Fractional decomposition of matrices and parallel computing*. Journal of Mathematical Study, J. Math. Study, 52 (2019), pp. 244-257.
- [6] S.M. Kaber, A. Loumi, P. Parnaudeau *Parallel Solutions of Linear Systems*. East Asian Journal on Applied Mathematics, 6 (3) (2016).
- [7] Y.Y. Lu, *Exponentials of symmetric matrices through tridiagonal reductions reductions*, Linear Algebra and its Applications, 279 (1998), pp. 317-324.
- [8] G. Meinardus, *Approximation of Functions : Theory and Numerical Methods* , Springer (1967)
- [9] C. Moler, Ch. Van Loan, *Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later*, Siam Review, vol. 45, No. 1 (2003).
- [10] L. N. Trefethen, *The Asymptotic Accuracy of Rational Best Approximation to $\exp(z)$ on a Disk*. Journal of Approximation Theory, 40 (1984), pp. 380-383.
- [11] E. B. Saff and R. S. Varga, *Zero-free parabolic regions for sequences of polynomials*, SIAM J. Math. Anal. 7 (1976), no. 3, 344–357.
- [12] G. Szegö, *Über eine Eigenschaft der Exponentialreihe*, Sitzungsber. Berl. Math. Ges. 23 (1924), 50-64.

- [13] R.S. Varga, *Scientific Computation on Mathematical Problems and Conjectures*, SIAM ed. (1990)
- [14] S.M. Zemyan, *On the Zeros of the Nth Partial Sums of the Exponential Series*, The American Mathematical Monthly, Vol. 112, No. 10 (2005).