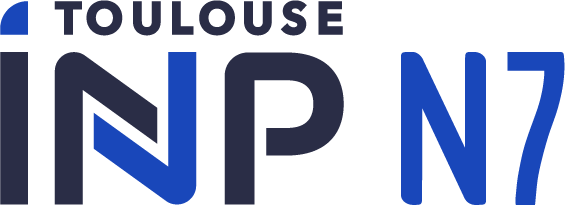
Mathis SIGIER, Alexy FIÉVET, Olivier BLOT

Calcul Scientifique



**Méthode d’itération des sous-espaces**

*19 Avril 2019*

Rappels et introduction

*Question 1)*

Temps d’éxécution en seconde

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | imat = 1 | Imat = 2 | Imat = 3 | Imat = 4 |
| 100 eig | 1.56\*10^-2 | 0 | 0 | 0 |
| 100 power\_v11 | 2.34\*10^-1 | 3.1\*10^-2 | 1.56\*10^-2 | 3.1\*10^-1 |
| 100 power\_v12 | 2\*10^-1 | 1.56\*10^-2 | 1.56\*10^-2 | 1\*10^-1 |
| 200 eig | 0 | 1.56\*10^-2 | 0 | 0 |
| 200 power\_v11 | 4.1 | 1.56\*10^-2 | 7.8\*10^-2 | 4.25 |
| 200 power\_v12 | 1.51 | 1.56\*10^-2 | 3.13\*10^-2 | 1.1 |

On remarque qu’en règle générale, plus on augmente la taille de la matrice plus on augmente le temps d’exécution du programme. De plus, les différents types de matrices ont aussi un impact sur le temps d’éxécution, par exemple, pour imat =1 et imat = 4, il y a des temps plus élevés. Cependant, les résultats sont tout de mêmes assez peu fiables puisqu’ils dépendent de la qualité de l’ordinateur.

Le temps d’éxécution de 1.56\*10^-2 secondes revient assez fréquemment, ce temps doit donc correspondre à un temps palier.

*Imat = 1*

Limites de la méthode

*Question 2)*

Algorithme 1 : Vector power method

Z=A·v  
β=vT ·Z

repeat

y =A·Z

v = y/ ∥y∥

Z=A·v

βold = β

β=vT ·Z

until |β − βold| / |βold| < ε λ1 = β and v1 = v

On a introduit dans l’algorithme une variable Z tel que Z= A\*V.

*Question 3)*

Le principal inconvénient de la méthode de puissance déflattée en termes de temps de calcul est le coût de la déflation elle-même. Cette étape nécessite la factorisation QR de la matrice, qui peut être coûteuse en temps pour les grandes matrices. Cependant, les itérations suivants la déflattation de la matrice sont plus rapides que la méthode de puissance standard car elles sont effectuées sur une matrice plus petite.

Extension de la méthode de la puissance pour calculer les vecteurs d’espaces propres dominants

*Question 4)*

Si on utilise plusieurs vecteurs pour la méthode de la puissance, la matrice vers laquelle V converge dépend des vecteurs initiaux. La méthode de la puissance avec un seul vecteur converge vers le vecteur propre associé à la plus grande valeur propre de A. Avec plusieurs vecteurs initiaux, la méthode converge vers une somme pondérée de vecteurs propres associés aux m plus grandes valeurs propres de la matrice A. En d'autres termes, la matrice V finale sera composée des vecteurs propres associés aux m plus grandes valeurs propres de A, mais avec des coefficients dépendant des vecteurs initiaux.

*Question 5)*

Bien que le but de l'algorithme soit d'éviter de calculer la décomposition spectrale de A, calculer celle de H ne pose pas de problème car H est une matrice plus petite que A. Donc, le temps de calcul nécessaire pour obtenir la décomposition spectrale de H est beaucoup moins important que celui requis pour obtenir la décomposition spectrale de A. De plus, une fois que H est obtenue, il est facile d'obtenir des paires propres de A à partir de celles de H, comme expliqué dans la section 2.1.3.

Subspace iter v1 : version améliorée utilisant la projection Raleigh-Ritz

*Question 7)*

Algorithme 4 : Méthode d’itération du sous-espace v1 avec projection de Raleigh-Ritz

Les numéros de lignes correspondent aux lignes du code Matlab implanté dans subspace\_iter\_v1.

k = 0;

PercentReached = 0

52. repeat

54. k=k+1

56. ComputeY such that Y =A·V

58. V ←− orthonormalization of the columns of Y 61. Rayleigh-Ritz projection applied on matrix A and orthonormal vectors V

70 -> 117. Convergence analysis step: save eigenpairs that have converged and update PercentReached

52. until ( PercentReached > PercentTrace or nev = m or k > MaxIter )

Subspace iter v2 et subspace iter v3 : vers un solveur efficace

*Question 8)*

Dans l'algorithme présenté, pour accélérer l'approche, il est proposé de remplacer la ligne V ←− orthonormalisation des colonnes de Y par V ←− Ap·V, où p est un nombre entier. Cela signifie que l'on calcule Ap et que l'on multiplie ce résultat par V. Le coût de ce calcul est de O(np^2) flops pour le calcul de Ap, et O(mp^2) flops pour le produit Ap·V.

Pour réduire le coût de calcul, une manière d'organiser différemment ce calcul consiste à utiliser une méthode de projection alternative appelée méthode de Lanczos. Cette méthode est plus rapide et nécessite seulement O(np) flops pour calculer Ap et O(mp) flops pour le produit Ap·V. Elle permet de construire une base orthonormale de la même dimension que celle obtenue par la méthode de la puissance, mais avec une complexité réduite.

*Question 10)*

L’ajout de cette implémentation fait que lorsqu’on augmente p, cela diminue le nombre d’itérations dans l’algorithme.

Cela a donc aussi pour effet de diminuer le temps d’éxécution du programme. Cependant, si p est trop élevé, le pourcentage de la trace que l’on souhaite atteindre peut ne pas être atteint avec 20 valeurs propres.

Méthode de déflation (subspace iter v3)

*Question 11)*

Si les vecteurs ayant des valeurs propres faibles en module sont au début de la matrice, alors les autres vecteurs, même s’ils ont des valeurs propres plus élevées en module et convergent, sont encore orthogonalisés ce qui fait perdre de l’efficacité. En effet, les vecteurs ayant des valeurs propres faibles en module convergent moins rapidement.

*Question 12)*

Expériences numériques

*Question 14)*

*Question 15)*