



Application des approximants de Padé au calcul de l'exponentielle d'une matrice

Jean-Rodolpe Roche

► To cite this version:

Jean-Rodolpe Roche. Application des approximants de Padé au calcul de l'exponentielle d'une matrice. Modélisation et simulation. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG; Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1980. Français. NNT : . tel-00292434

HAL Id: tel-00292434

<https://theses.hal.science/tel-00292434>

Submitted on 1 Jul 2008

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.

THESE

présentée à

**Université Scientifique et Médicale de Grenoble
Institut National Polytechnique de Grenoble**

pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE 3ème CYCLE
Mathématiques appliquées
option: analyse numérique

par

ROCHE Jean Rodolphe



**APPLICATION DES APPROXIMANTS DE PADE
AU CALCUL DE L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE.**



Thèse soutenue le 20 juin 1980 devant la commission d'examen

Madame F. CHATELIN **Président**

Messieurs N. GASTINEL
A.Y. BARRAUD **Examineurs**
C. BREZINSKI
J. DELLA DORA

UNIVERSITE SCIENTIFIQUE ET MEDICALE DE GRENOBLE

Monsieur Gabriel CAU : Président

Monsieur Joseph KLEIN : Vice-Président

MEMBRES DU CORPS ENSEIGNANT DE L'U.S.M.G.

PROFESSEURS TITULAIRES

MM.	AMBLARD Pierre	Clinique de dermatologie
	ARNAUD Paul	Chimie
	ARVIEU Robert	I.S.N.
	AUBERT Guy	Physique
	AYANT Yves	Physique approfondie
Mme	BARBIER Marie-Jeanne	Electrochimie
MM.	BARBIER Jean-Claude	Physique expérimentale
	BARBIER Reynold	Géologie appliquée
	BARJON Robert	Physique nucléaire
	BARNOUD Fernand	Biosynthèse de la cellulose
	BARRA Jean-René	Statistiques
	BARRIE Joseph	Clinique chirurgicale A
	BEAUDOING André	Clinique de pédiatrie et puériculture
	BELORIZKY Elie	Physique
	BARNARD Alain	Mathématiques pures
Mme	BERTRANDIAS Françoise	Mathématiques pures
MM.	BERTRANDIAS Jean-Paul	Mathématiques pures
	BEZES Henri	Clinique chirurgicale et traumatologie
	BLAMBERT Maurice	Mathématiques pures
	BOLLIET Louis	Informatique (I.U.T. B)
	BONNET Jean-Louis	Clinique ophtalmologie
	BONNET-EYMARD Joseph	Clinique hépato-gastro-entérologie
Mme	BONNIER Marie-Jeanne	Chimie générale
MM.	BOUCHERLE André	Chimie et toxicologie
	BOUCHEZ Robert	Physique nucléaire
	BOUSSARD Jean-Claude	Mathématiques appliquées
	BOUTET DE MONVEL Louis	Mathématiques pures
	BRAVARD Yves	Géographie
	CABANEL Guy	Clinique rhumatologique et hydrologique
	CALAS François	Anatomie
	CARLIER Georges	Biologie végétale
	CARRAZ Gilbert	Biologie animale et pharmacodynamie

MM.	CAU Gabriel	Médecine légale et toxicologie
	CAUQUIS Georges	Chimie organique
	CHABAUTY Claude	Mathématiques pures
	CHARACHON Robert	Clinique ot-rhino-laryngologique
	CHATEAU Robert	Clinique de neurologie
	CHIBON Pierre	Biologie animale
	COEUR André	Pharmacie chimique et chimie analytique
	COUDERC Pierre	Anatomie pathologique
	DEBELMAS Jacques	Géologie générale
	DEGRANGE Charles	Zoologie
	DELORMAS Pierre	Pneumophtisiologie
	DEPORTES Charles	Chimie minérale
	DESRE Pierre	Métallurgie
	DODU Jacques	Mécanique appliquée (I.U.T. I)
	DOLIQUE Jean-Michel	Physique des plasmas
	DREYFUS Bernard	Thermodynamique
	DUCROS Pierre	Cristallographie
	FONTAINE Jean-Marc	Mathématiques pures
	GAGNAIRE Didier	Chimie physique
	GALVANI Octave	Mathématiques pures
	GASTINEL Noël	Analyse numérique
	GAVEND Michel	Pharmacologie
	GEINDRE Michel	Electroradiologie
	GERBER Robert	Mathématiques pures
	GERMAIN Jean-Pierre	Mécanique
	GIRAUD Pierre	Géologie
	JANIN Bernard	Géographie
	KAHANE André	Physique générale
	KLEIN Joseph	Mathématiques pures
	KOSZUL Jean-Louis	Mathématiques pures
	KRAVTCHENKO Julien	Mécanique
	LACAZE Albert	Thermodynamique
	LACHARME Jean	Biologie végétale
Mme	LAJZEROWICZ Janine	Physique
MM.	LAJZEROWICZ Joseph	Physique
	LATREILLE René	Chirurgie générale
	LATURAZE Jean	Biochimie pharmaceutique
	LAURENT Pierre	Mathématiques appliquées
	LEDRU Jean	Clinique médicale B
	LE ROY Philippe	Mécanique (I.U.T. I)

MM.	LLIBOUTRY Louis	Géophysique
	LOISEAUX Jean-Marie	Sciences nucléaires
	LONGEQUEUE Jean-Pierre	Physique nucléaire
	LOUP Jean	Géographie
Mlle	LUTZ Elisabeth	Mathématiques pures
MM.	MALINAS Yves	Clinique obstétricale
	MARTIN-NOEL Pierre	Clinique cardiologique
	MAYNARD Roger	Physique du solide
	MAZARE Yves	Clinique Médicale A
	MICHEL Robert	Minéralogie et pétrographie
	MICOUD Max	Clinique maladies infectieuses
	MOURIQUAND Claude	Histologie
	MOUSSA André	Chimie nucléaire
	NEGRE Robert	Mécanique
	NOZIERES Philippe	Spectrométrie physique
	OZENDA Paul	Botanique
	PAYAN Jean-Jacques	Mathématiques pures
	PEBAY-PEYROULA Jean-Claude	Physique
	PERRET Jean	Séméiologie médicale (neurologie)
	RASSAT André	Chimie systématique
	RENARD Michel	Thermodynamique
	REVOL Michel	Urologie
	RINALDI Renaud	Physique
	DE ROUGEMONT Jacques	Neuro-Chirurgie
	SARRAZIN Roger	Clinique chirurgicale B
	SEIGNEURIN Raymond	Microbiologie et hygiène
	SENGEL Philippe	Zoologie
	SIBILLE Robert	Construction mécanique (I.U.T. I)
	SOUTIF Michel	Physique générale
	TANCHE Maurice	Physiologie
	VAILLANT François	Zoologie
	VALENTIN Jacques	Physique nucléaire
Mme	VERAIN Alice	Pharmacie galénique
MM.	VERAIN André	Physique biophysique
	VEYRET Paul	Géographie
	VIGNAIS Pierre	Biochimie médicale

PROFESSEURS ASSOCIES

MM. CRABBE Pierre
SUNIER Jules

CERMO
Physique

PROFESSEURS SANS CHAIRE

Mlle AGNIUS-DELORS Claudine
ALARY Josette

MM. AMBROISE-THOMAS Pierre

ARMAND Gilbert

BENZAKEN Claude

BIAREZ Jean-Pierre

BILLET Jean

BOUCHET Yves

BRUGEL Lucien

BUISSON René

BUTEL Jean

COHEN-ADDAD Jean-Pierre

COLOMB Maurice

CONTE René

DELOBEL Claude

DEPASSEL Roger

GAUTRON René

GIDON Paul

GLENAT René

GROULADE Joseph

HACQUES Gérard

HOLLARD Daniel

HUGONOT Robert

IDELMAN Simon

JOLY Jean-René

JULLIEN Pierre

Mme KAHANE Josette

MM. KRAKOWIACK Sacha

KUHN Gérard

LUU DUC Cuong

MICHOULIER Jean

Mme MINIER Colette

Physique pharmaceutique

Chimie analytique

Parasitologie

Géographie

Mathématiques appliquées

Mécanique

Géographie

Anatomie

Energétique (I.U.T. I)

Physique (I.U.T. I)

Orthopédie

Spectrométrie physique

Biochimie médicale

Physique (I.U.T. I)

M.I.A.G.

Mécanique des fluides

Chimie

Géologie et minéralogie

Chimie organique

Biochimie médicale

Calcul numérique

Hématologie

Hygiène et médecine préventive

Physiologie animale

Mathématiques pures

Mathématiques appliquées

Physique

Mathématiques appliquées

Physique (I.U.T. I)

Chimie organique - pharmacie

Physique (I.U.T. I)

Physique (I.U.T. I)

MM.	PELMONT Jean	Biochimie
	PERRIAUX Jean-Jacques	Géologie et minéralogie
	PFISTER Jean-Claude	Physique du solide
Mlle	PIERY Yvette	Physiologie animale
MM.	RAYNAUD Hervé	M.I.A.G.
	REBECQ Jacques	Biologie (CUS)
	REYMOND Jean-Charles	Chirurgie générale
	RICHARD Lucien	Biologie végétale
Mme	RINAUDO Marguerite	Chimie macromoléculaire
MM.	SARROT-REYNAULD Jean	Géologie
	SIROT Louis	Chirurgie générale
Mme	SOUTIF Jeanne	Physique générale
MM.	STIEGLITZ Paul	Anesthésiologie
	VIALON Pierre	Géologie
	VAN CUTSEM Bernard	Mathématiques appliquées

MAITRES DE CONFERENCES ET MAITRES DE CONFERENCES AGREGES

MM.	ARMAND Yves	Chimie (I.U.T. I)
	BACHELOT Yvan	Endocrinologie
	BARGE Michel	Neuro-chirurgie
	BEGUIN Claude	Chimie organique
Mme	BERIEL Hélène	Pharmacodynamie
MM.	BOST Michel	Pédiatrie
	BOUCHARLAT Jacques	Psychiatrie adultes
Mme	BOUCHE Liane	Mathématiques (CUS)
MM.	BRODEAU François	Mathématiques (I.U.T. B) (Personne étrangère habilitée à être directeur de thèse)
	BERNARD Pierre	Gynécologie
	CHAMBAZ Edmond	Biochimie médicale
	CHAMPETIER Jean	Anatomie et organogénèse
	CHARDON Michel	Géographie
	CHERADAME Hervé	Chimie papetière
	CHIAVERINA Jean	Biologie appliquée (EFP)
	COLIN DE VERDIERE Yves	Mathématiques pures
	CONTAMIN Charles	Chirurgie thoracique et cardio-vasculaire
	CORDONNER Daniel	Néphrologie
	COULOMB Max	Radiologie
	CROUZET Guy	Radiologie

MM.	CYROT Michel	Physique du solide
	DENIS Bernard	Cardiologie
	DOUCE Roland	Physiologie végétale
	DUSSAUD René	Mathématiques (CUS)
Mme	ETERRADOSSI Jacqueline	Physiologie
MM.	FAURE Jacques	Médecine légale
	FAURE Gilbert	Urologie
	GAUTIER Robert	Chirurgie générale
	GIDON Maurice	Géologie
	GROS Yves	Physique (I.U.T. I)
	GUIGNIER Michel	Thérapeutique
	GUITTON Jacques	Chimie
	HICTER Pierre	Chimie
	JALBERT Pierre	Histologie
	JUNIEN-LAVILLAVROY Claude	O.R.L.
	KOLODIE Lucien	Hématologie
	LE NOC Pierre	Bactériologie-virologie
	MACHE Régis	Physiologie végétale
	MAGNIN Robert	Hygiène et médecine préventive
	MALLION Jean-Michel	Médecine du travail
	MARECHAL Jean	Mécanique (I.U.T. I)
	MARTIN-BOUYER Michel	Chimie (CUS)
	MASSOT Christian	Médecine interne
	NEMOZ Alain	Thermodynamique
	NOUGARET Marcel	Automatique (I.U.T. I)
	PARAMELLE Bernard	Pneumologie
	PECCOUD François	Analyse (I.U.T. B) (Personnalité étrangère habilitée à être directeur de thèse)
	PEFFEN René	Métallurgie (I.U.T. I)
	PERRIER Guy	Géophysique-glaciologie
	PHELIP Xavier	Rhumatologie
	RACHALL Michel	Médecine interne
	RACINET Claude	Gynécologie et obstétrique
	RAMBAUD Pierre	Pédiatrie
	RAPHAEL Bernard	Stomatologie
Mme	RENAUDET Jacqueline	Bactériologie (pharmacie)
MM.	ROBERT Jean-Bernard	Chimie-physique
	ROMIER Guy	Mathématiques (I.U.T. B) (Personnalité étrangère habilitée à être directeur de thèse)
	SAKAROVITCH Michel	Mathématiques appliquées

MM. SCHAERER René	Cancérologie
Mme SEIGLE-MURANDI Françoise	Cryptogamie
MM. STOEbNER Pierre	Anatomie pathologie
STUTZ Pierre	Mécanique
VROUSOS Constantin	Radiologie

MAITRES DE CONFERENCES ASSOCIES

MM. DEVINE Roderick	Spectro Physique
KANEKO Akira	Mathématiques pures
JOHNSON Thomas	Mathématiques appliquées
RAY Tuhina	Physique

MAITRE DE CONFERENCES DELEGUE

M. ROCHAT Jacques	Hygiène et hydrologie (pharmacie)
-------------------	-----------------------------------

Fait à Saint Martin d'Hères, novembre 1977

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

Année universitaire 1979-1980

Président : M. Philippe TRAYNARD

Vice-Présidents : M. Georges LESPINARD
M. René PAUTHENET

PROFESSEURS DES UNIVERSITES

MM.	ANCEAU François	Informatique fondamentale et appliquée
	BENOIT Jean	Radioélectricité
	BESSON Jean	Chimie Minérale
	BLIMAN Samuel	Electronique
	BLOCH Daniel	Physique du Solide - Cristallographie
	BOIS Philippe	Mécanique
	BONNETAIN Lucien	Génie Chimique
	BONNIER Etienne	Métallurgie
	BOUVARD Maurice	Génie Mécanique
	BRISSONNEAU Pierre	Physique des Matériaux
	BUYLE-BODIN Maurice	Electronique
	CHARTIER Germain	Electronique
	CHERADAME Hervé	Chimie Physique Macromoléculaires
Mme	CHERUY Arlette	Automatique
MM.	CHIAVERINA Jean	Biologie, Biochimie, Agronomie
	COHEN Joseph	Electronique
	COUMES André	Electronique
	DURAND Francis	Métallurgie
	DURAND Jean-Louis	Physique Nucléaire et Corpusculaire
	FELICI Noël	Electrotechnique
	FOULARD Claude	Automatique
	GUYOT Pierre	Métallurgie Physique
	IVANES Marcel	Electrotechnique
	JOUBERT Jean-Claude	Physique du Solide - Cristallographie
	LACOUME Jean-Louis	Géographie - Traitement du Signal
	LANCIA Roland	Electronique - Automatique
	LESIEUR Marcel	Mécanique
	LESPINARD Georges	Mécanique
	LONGEQUEUE Jean-Pierre	Physique Nucléaire Corpusculaire
	MOREAU René	Mécanique
	MORET Roger	Physique Nucléaire Corpusculaire
	PARIAUD Jean-Charles	Chimie - Physique
	PAUTHENET René	Physique du Solide - Cristallographie
	PERRET René	Automatique

MM.	PERRET Robert	Electrotechnique
	PIAU Jean-Michel	Mécanique
	PIERRARD Jean-Marie	Mécanique
	POLOUJADOFF Michel	Electrotechnique
	POUPOT Christian	Electronique - Automatique
	RAMEAU Jean-Jacques	Chimie
	ROBERT André	Chimie Appliquée et des matériaux
	ROBERT François	Analyse numérique
	SABONNADIÈRE Jean-Claude	Electrotechnique
Mme	SAUCIER Gabrielle	Informatique fondamentale et appliquée
M.	SOHM Jean-Claude	Chimie - Physique
Mme	SCHLENKER Claire	Physique du Solide - Cristallographie
MM.	TRAYNARD Philippe	Chimie - Physique
	VEILLON Gérard	Informatique fondamentale et appliquée
	ZADWORNÝ François	Electronique

CHERCHEURS DU C.N.R.S. (Directeur et Maître de Recherche)

M.	FRUCHART Robert	Directeur de Recherche
MM.	ANSARA Ibrahim	Maître de Recherche
	BRONOEL Guy	Maître de Recherche
	CARRE René	Maître de Recherche
	DAVID René	Maître de Recherche
	DRIOLE Jean	Maître de Recherche
	KAMARINOS Georges	Maître de Recherche
	KLEITZ Michel	Maître de Recherche
	LANDAU Ioan-Doré	Maître de Recherche
	MERMET Jean	Maître de Recherche
	MUNIER Jacques	Maître de Recherche

Personnalités habilitées à diriger des travaux de recherche (décision du Conseil Scientifique)

E.N.S.E.E.G.

MM.	ALLIBERT Michel
	BERNARD Claude
	CAILLET Marcel
Mme	CHATILLON Catherine
MM.	COULON Michel
	HAMMOU Abdelkader
	JOUD Jean-Charles
	RAVAINE Denis
	SAINFORT

C.E.N.G.

.../...

MM. SARRAZIN Pierre
 SOUQUET Jean-Louis
 TOUZAIN Philippe
 URBAIN Georges

Laboratoire des Ultra-Réfractaires ODEILLO

E.N.S.M.E.E.

MM. BISCONDI Michel
 BOOS Jean-Yves
 GUILHOT Bernard
 KOBILANSKI André
 LALAUZE René
 LANCELOT François
 LE COZE Jean
 LESBATS Pierre
 SOUSTELLE Michel
 THEVENOT François
 THOMAS Gérard
 TRAN MINH Canh
 DRIVER Julian
 RIEU Jean

E.N.S.E.R.G.

MM. BOREL Joseph
 CHEHIKIAN Alain
 VIKTOROVITCH Pierre

E.N.S.I.E.G.

MM. BORNARD Guy
 DESCHIZEAUX Pierre
 GLANGEAUD François
 JAUSSAUD Pierre
 Mme JOURDAIN Geneviève
 MM. LEJEUNE Gérard
 PERARD Jacques

E.N.S.H.G.

M. DELHAYE Jean-Marc

E.N.S.I.M.A.G.

MM. COURTIN Jacques
 LATOMBE Jean-Claude
 LUCAS Michel
 VERDILLON André

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à :

Madame le Professeur CHATELIN qui m'a fait l'honneur de présider le jury.

Monsieur le Professeur Noël GASTINEL, qui a dirigé cette thèse.
Ses nombreux conseils et encouragements m'ont été précieux dans l'accomplissement de ce travail.

Monsieur BARRAUD, pour les suggestions apportées à cette étude et pour l'attention qu'il a bien voulu m'accorder.

Monsieur DELLA DORA, pour sa disponibilité, ainsi que la sympathie qu'il m'a témoignée.

Que Monsieur le Professeur BREZINSKI me permette de lui exprimer combien je suis sensible à l'honneur qu'il me fait en acceptant de faire partie du jury.

Je tiens à remercier Mademoiselle ASSADAS qui a apporté le plus grand soin à la réalisation de ce document et toute l'équipe du service de reprographie, qui a réalisé le tirage.

INTRODUCTION

Certains modèles mathématiques en sciences physiques et particulièrement en automatique introduisant le problème de calculer avec une précision importante la solution du système

$$(1) \quad \begin{cases} \frac{d}{dt} X(t) = A X(t) \\ X(0) = I ; t \geq 0 \end{cases}$$

où A est une matrice NxN à coefficients réels et I la matrice identité NxN.

C'est-à-dire calculer

$$(2) \quad e^{At} = \text{Exp}(At) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k t^k}{k!} ; t \geq 0$$

Il existe un grand nombre de méthodes numériques pour faire le calcul de l'exponentielle d'une matrice, à commencer par le calcul d'une somme partielle de la série (2), très instable numériquement, ou une méthode de type Runge Kutta pour résoudre (1), très onéreuse.

Ce travail porte sur le calcul de l'exponentielle d'une matrice par des méthodes dérivées de la théorie de l'approximation de fonctions analytiques et plus particulièrement par des méthodes où les approximants de Padé jouent un rôle fondamental.

Dans le premier chapitre, on expose les principales définitions pour traiter notre problème. Ensuite, on donne une nouvelle borne de la norme de l'exponentielle d'une matrice. On pose alors le problème appelé par Van Loan [32] "sensibilité de l'exponentielle d'une matrice", en faisant sur ce sujet un tour d'horizon et l'on finit par donner un nouveau résultat :

le théorème 4 où l'on étudie la différence $e^{At} - e^{(A+B)t}$.

Dans le deuxième chapitre, on introduit les approximants de Padé de l'exponentielle. On commence par les travaux d'Hermite [21] et Padé [22] pour poursuivre avec les bornes d'erreur données par Underhill et Gragg [26]. On en tire des conclusions sur l'application des approximants de Padé au calcul de l'exponentielle d'une matrice.

Au troisième chapitre, on étudie deux méthodes numériques pour calculer l'exponentielle d'une matrice à l'aide des approximants de Padé. Une première méthode, due à Ward [33], et une deuxième originale qu'on appelle

"par transformation du spectre". On expose les deux algorithmes et ses propriétés. Une étude de l'erreur absolue faite par Ward est reprise, et une autre, pour la méthode "par transformation du spectre" est développée.

On présente ensuite des exemples numériques qu'illustrent les applications de ces deux méthodes et les avantages que présente la méthode par "transformation du spectre".

Au quatrième chapitre, on étudie une méthode qui consiste à "bloc diagonaliser" la matrice A suivant un algorithme de Bavely et Stewart [17] et appliquer la méthode par "transformation du spectre" sur les blocs. On donne des exemples d'application de cette méthode.

Dans un cinquième chapitre, on étudie une méthode qui utilise le développement en série des polynômes de Chebyscheff de l'exponentielle pour obtenir, par la méthode de Clenshaw, une somme partielle.

On détermine les coefficients des termes de la série nécessaires pour que leur somme donne une approximation théorique d'une précision voulue. On étudie une borne absolue de l'erreur de notre approximation.

Dans le sixième chapitre, on expose une méthode due à Vignes [12] pour calculer l'erreur commise quand on calcule l'exponentielle d'une matrice par une méthode de Padé, et ensuite on le met en pratique sur la méthode de Ward et sur celle par "bloc diagonalization".

CHAPITRE 1

FONCTIONS MATRICIELLES, EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE

1. Fonction de matrice associée à une fonction analytique

On considère dans ce chapitre des matrices de taille $N \times N$ construites sur le corps des nombres complexes.

On notera cet ensemble $M_{(N \times N)}(\mathbb{C})$.

Définition : Soit $\{A_i\}_{i \in \mathbb{N}}$; $A_i \in M_{(N \times N)}(\mathbb{C})$, une suite de matrices, elle est dite convergente si :

$$1) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} a_{ij}^{(n)} = a_{ij}$$

où $a_{ij}^{(n)}$ est le coefficient (i,j) de A_n , et la limite est la matrice $A = (a_{ij})$.

Une série $A_0 + A_1 + \dots$ est dite convergente si la suite de sommes partielles converge.

Si on considère maintenant une fonction analytique autour de zéro, on peut la développer en série de puissance.

Cette série a un rayon de convergence non nul.

Donc, si $g : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ est la fonction représentée par :

$$2) \quad g(z) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i z^i, \quad |z| < r$$

on considère la série matricielle associée :

$$3) \quad g(A) = a_0 I + a_1 A + a_2 A^2 + \dots$$

On étudie maintenant le problème de la convergence d'une série matricielle ainsi définie.

Théorème 1 : Soit $g(z)$ une série de puissances convergente dans l'intérieur du cercle de centre 0 et rayon R.

Soit $g(A)$ la série matricielle associée.

Alors $g(A)$ converge dans le sous ensemble de $M_{(N \times N)}(\mathbb{C})$ constitué de matrices qui ont leur valeurs propres dans l'intérieur du cercle de centre 0 et rayon R.

Démonstration :

On peut écrire $A = X J X^{-1}$ où J est la forme de Jordan de A.

$$4) \quad J = \text{diag} (J_{k_i}, i = 1, \dots, r)$$

$$5) \quad J_{k_i} = \lambda_{k_i} I_{k_i} + M_{k_i} \text{ où } \lambda_{k_i} \text{ est une valeur propre de A, } M_{k_i} \text{ est la matrice de taille } k_i \times k_i \text{ avec des coefficients égaux à 1 si } j = i + 1 \text{ et 0 sinon.}$$

Si on note maintenant :

$$6) \quad g_n(z) = \sum_{i=0}^n a_i z^i$$

et

$$7) \quad g_n(A) = \sum_{i=0}^n a_i A^i$$

Alors :

$$8) \quad g_n(A) = \sum_{i=0}^n a_i A^i = X \text{ diag } \{g_n(J_{k_i}) \mid i = 1, \dots, r\} X^{-1}$$

Si on développe g_n autour de λ_{k_i} en série de Taylor on a :

$$9) \quad g_n(z) = g(\lambda_{k_i}) + (z - \lambda_{k_i}) g'(\lambda_{k_i}) + \dots + (z - \lambda_{k_i})^n \frac{g^{(n)}(\lambda_{k_i})}{n!}$$

donc

$$10) \quad g_n(J_{k_i}) = g(\lambda_{k_i})I + (J_{k_i} - \lambda_{k_i}I) g'(\lambda_{k_i}) + \dots + (J_{k_i} - \lambda_{k_i}I)^n \frac{g^{(n)}(\lambda_i)}{n!}$$

Si $n \geq k_i - 1$

$$11) \quad g_n(J_{k_i}) = \sum_{k=0}^{k_i-1} g^{(k)}(\lambda_{k_i}) \frac{M_{k_i}^k}{k!}$$

Car $M_{k_i}^{k_i} = 0$.

C'est-à-dire que si $k_i < n$ on a :

$$12) \quad g_n(J_{k_i}(\lambda_{k_i})) = \begin{bmatrix} g_n(\lambda_{k_i}) & g'_n(\lambda_{k_i}) & \dots & \frac{g_n^{(k_i-1)}(\lambda_{k_i})}{(k_i-1)!} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & g'_n(\lambda_{k_i}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & g_n(\lambda_{k_i}) \end{bmatrix}$$

Donc si λ_{k_i} appartient au cercle de convergence de g lorsque n tend vers l'infini on a :

$$13) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} g_n^{(k)}(\lambda_k) = g^{(k)}(\lambda_k) \text{ pour tout } k > 0$$

et

$$14) \quad g(J_{k_i}) = \begin{bmatrix} g(\lambda_{k_i}) & \dots & \frac{g^{(k_i-1)}(\lambda_{k_i})}{(k_i-1)!} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & g(\lambda_{k_i}) \end{bmatrix}$$

Donc

$g(A) = X \operatorname{dig}(g(J_{k_i}), i = 1, \dots, r) X^{-1}$ où $g(J_{k_i})$ est définie par la formule
 14) si λ_{k_i} appartient au cercle de convergence de g .

De la démonstration de ce théorème on tire immédiatement le résultat suivant :

Théorème 2 : Soit f une fonction analytique sur un cercle de rayon R .

Soit A une matrice $N \times N$ avec des valeurs propres λ_{k_i} de multiplicité k_i et telles que $|\lambda_{k_i}| < R$.

Alors $f(\lambda_{k_i})$ est une valeur propre de $f(A)$ de multiplicité k_i .

2. Détermination de la fonction d'une matrice par la formule de Cauchy. Smirnov [5]

Si on considère encore la série $g(z)$ convergente dans le cercle de rayon R et la série de matrices associée $g(A)$, où les valeurs propres de A sont dans l'intérieur du cercle de convergence de $g(z)$, on peut utiliser l'intégrale de Cauchy pour représenter $g(A)$.

On verra donc que :

$$15) \quad g(A) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (zI - A)^{-1} g(z) dz$$

où $\Gamma \subset \mathbb{C}$ est une courbe simple fermée de Jordan de $\mathbb{C}$ qui entoure les valeurs propres de A .

Lemme 1 :

Soit g une série qui converge dans l'intérieur d'un cercle de centre 0 et rayon R .

Soit A une matrice $N \times N$ telle que ses valeurs propres soient à l'intérieur du cercle de convergence de g .

Soit $\Gamma \subset \mathbb{C}$ une courbe simple fermée de Jordan de $\mathbb{C}$ qui entoure les valeurs propres de A .

Alors :

$$g(A) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (zI-A)^{-1} g(z) dz$$

Démonstration

Soit

$$\varphi(A) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (zI-A)^{-1} g(z) dz$$

On verra que $\varphi(A) = g(A)$.

Si on écrit $A = X J X^{-1}$, J forme de Jordan on a que :

$$(zI-A)^{-1} = (zIXX^{-1} - XJX^{-1})^{-1} = X(zI-J)^{-1} X^{-1}$$

où

$$(zI-J)^{-1} = \text{diag} \{ (zI-J_{k_i})^{-1} ; i = 1, \dots, r \}$$

Donc on trouve que :

$$\varphi(A) = X \text{diag} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (zI-J_{k_i})^{-1} g(z) dz \right\} X^{-1}$$

Mais

$$(zI - J_{k_i})^{-1} =$$

$$\begin{bmatrix} (z-\lambda_{k_i})^{-1} & \dots & (z-\lambda_{k_i})^{-k_i} \\ & \ddots & \vdots \\ & & (z-\lambda_{k_i})^{-1} \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & (z-\lambda_{k_i})^{-1} \end{bmatrix}$$

alors :

$$17) \quad (zI-A)^{-1} = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{z^{N-k-1}}{\text{Det}(z)} A_k$$

La démonstration de ce procédé pour calculer l'inverse d'une matrice a été exposée dans N. Gastinel [4] .

4. La fonction exponentielle d'une matrice

Si on considère maintenant la série :

$$e^x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{i!}$$

convergente dans tout le plan complexe, alors la série matricielle associée, est convergente dans tout l'ensemble $M_{(N \times N)}(\mathbb{C})$.

On notera cette série matricielle naturellement : exponentielle de la matrice A.

$$\text{Donc, } \text{Exp}(A) = e^A = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{A^i}{i!}$$

On remarque ensuite que si on considère le système d'équations différentielles ordinaires :

$$(I) \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt}(t) = A x(t) \\ x(0) = I \end{cases}$$

l'exponentielle de la matrice $A \times t$ est une solution de ce problème.

5. Propriétés de l'exponentielle d'une matrice Bellman [1]

La fonction exponentielle d'une matrice présente plusieurs propriétés, qu'on tire de sa représentation en série ou du fait qu'elle est solution du système (I)

$$18) \quad \|e^{At}\| \leq e^{\|A\| |t|}, \text{ donc } e^{At} \text{ converge uniformément.}$$

$$19) \quad e^{As} e^{At} = e^{A(s+t)}, \text{ on obtient ce résultat directement en tenant compte de 18).}$$

$$20) e^{A+B} = e^A \cdot e^B \cdot e^{-[A,B]/2} = e^B \cdot e^A \cdot e^{[A,B]/2}$$

où $[A,B] = AB-BA$ (Crochet de Lie)

Démonstration :

$$e^{A+B} = I + (A+B) + \frac{(A+B)^2}{2} + \frac{(A+B)^3}{3!} + \dots$$

$$= I + (A+B) + \frac{A^2 + AB + BA + B^2}{2} + \dots$$

$$e^A e^B = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{B^i}{i!} = I + (A+B) + AB + \frac{A^2}{2} + \frac{B^2}{2} + \frac{AB^2}{2}$$

Donc :

$$e^{A+B} - e^A e^B = \frac{[BA-AB]}{2} + \dots = -\frac{[A,B]}{2} e^{-[A,B]/2}$$

pour 19)

$$e^{-B} e^{-A} e^{A+B} = I - \frac{[A,B]}{2} e^{-[A,B]/2} = e^{-[A,B]/2}$$

donc :

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2}$$

Il est donc évident que $e^{A+B} = e^A e^B$ si et seulement si $AB = BA$.

$$21) e^{At} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (zI-A)^{-1} e^{zt} dz ; \text{ où } \Gamma \text{ est une courbe simple fermée de}$$

Jordan qui entoure les valeurs propres de A. La démonstration est tirée directement du lemme 1.

Si on considère maintenant le fait que e^{Ay} est solution de (I) et un deuxième système donné par :

$$(II) \quad \begin{cases} \frac{dY(t)}{dt} = A Y(t) + B Y(t) \\ Y(0) = I \end{cases}$$

on a que $Y(t)$ satisfait l'équation intégrale suivante :

$$22) \quad e^{(A+B)t} = Y(t) = e^{At} + \int_0^t e^{A(t-z)} B e^{(A+B)s} ds$$

On peut maintenant donner un théorème classique sur la stabilité de l'exponentielle d'une matrice.

Théorème 3 :

Une condition nécessaire et suffisante pour que e^{At} tende vers zéro lorsque t tend vers l'infini est que les valeurs propres de A aient une partie réelle négative.

Démonstration : Si on décompose $A = XJX^{-1}$ où J est la forme de Jordan de A , à l'aide de la formule 14) on obtient ce résultat sans difficultés.

Maintenant, on va étudier la norme de l'exponentielle d'une matrice.

6. Norme de l'exponentielle d'une matrice

On étudiera les normes de e^{At} de type $S_{\varphi_i \varphi_i}(A)$ où $i = 1, 2, \infty$, c'est-à-dire :

$$23) \quad \|e^{At}\|_i = S_{\varphi_i \varphi_i}(e^{At}) = \sup \frac{\varphi_i(e^{At}x)}{\varphi_i(x)} \quad \text{où } i = 1, 2, \infty$$

La première remarque que l'on peut faire est que la norme de l'exponentielle e^{At} , tend vers zéro lorsque t tend vers l'infini si les valeurs propres de A ont la partie réelle négative, corollaire du théorème 3.

Si on note de la même façon que Van Loan [32]

$$\alpha(A) = \max \{ \operatorname{Re}(\lambda) / \lambda \in \sigma(A) \}$$

on trouve que :

$$e^{\alpha(A)t} \leq \|e^{At}\| \quad t \geq 0$$

corollaire immédiat du théorème 2.

La décomposition de Schur nous permet de tirer une borne de la norme de l'exponentielle d'une matrice.

Il existe une matrice unitaire Q telle que la matrice A peut s'écrire

$$23) \quad A = Q^* (D+T)Q \quad \text{où} \quad Q^* = (\bar{q}_{ij}) ,$$

T est strictement triangulaire supérieure et D est diagonale.

Si A est normale c'est-à-dire si $T = \bar{0}$ on trouve que :

$$24) \quad ||e^{At}||_2 \leq ||Q^*||_2 ||Q||_2 e^{\alpha(A)t} = e^{\alpha(A)t} \quad t \geq 0$$

donc si A est normale $||e^{At}||_2 = e^{\alpha(A)t}$.

Maintenant si A n'est pas normale on peut tirer une borne de la norme à partir de la décomposition de Schur (Van Loan [32])

$$25) \quad ||e^{At}|| \leq e^{\alpha(A)t} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{||Tt||^k}{k!}$$

Démonstration

La formule 22) nous permet d'écrire :

$$e^{(D+T)t} = e^{Dt} + \int_0^t e^{D(t-t_1)} T e^{(D+T)t_1} dt_1$$

Si on répète le procédé N fois ($A \in M_{(N \times N)}$), chaque fois sur $e^{(D+T)t_1}$ on obtient :

$$26) \quad e^{(D+T)t} = e^{Dt} + \sum_{k=1}^{N-1} C_k(t) + R_N(t) \quad \text{où}$$

$$27) \quad C_k(t) = \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{k-1}} e^{D(t-t_1)} T e^{D(t_1-t_2)} T \dots T e^{Dt_k} dt_k \dots dt_1$$

$$28) \quad R_N(t) = \int_0^t \dots \int_0^{t_{N-1}} e^{D(t-t_1)} T \dots T e^{D(t_n-t_n)} T e^{(D+T)t_n} dt_n \dots dt_1$$

Mais $e^{D(t_{i-1}-t_i)} T$ est triangulaire supérieure stricte donc : $R_N(t) = 0$.

Alors :

$$29) \quad e^{(D+T)t} = e^{Dt} + \sum_{k=1}^{N-1} \int_0^t \dots \int_0^{t_{k-1}} e^{D(t-t_1)} T \dots T e^{Dt_k} dt_k \dots dt_1$$

$$\text{et } ||e^{Dt}|| = e^{\alpha(D)t} = e^{\alpha(A)t} ; t \geq 0$$

Si on calcule maintenant la norme de e^{At} ; $t \geq 0$ on a

$$\begin{aligned} ||e^{At}|| &\leq ||e^{Dt}|| + \sum_{k=1}^{N-1} \int_0^t \dots \int_0^{t_{k-1}} ||e^{D(t-t_1)}|| ||T|| \dots ||T|| ||e^{Dt_k}|| dt_k \dots dt_1 \\ &\leq e^{\alpha(A)t} \left(1 + \sum_{k=1}^{N-1} \frac{||Tt||^k}{k!} \right) = e^{\alpha(A)t} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{||Tt||^k}{k!} \end{aligned}$$

Ainsi, on a une borne de la norme de l'exponentielle d'une matrice qui est plus élaborée que 18). On tient compte des valeurs propres de A et de ce que Van Loan [32] appelle écartement de la normalité, T.

La forme de Jordan de A donne aussi origine a une borne de la norme de l'exponentielle d'une matrice assez fine car elle tient compte des valeurs propres de A.

Si $\sigma(A) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_r\}$ et k_1 est la multiplicité de λ_1 en tant que valeur propre de A.

$$30) \quad ||e^{J_{k_1} t}|| \leq k_1 e^{\operatorname{Re}(\lambda_1)t} \max_{0 \leq j \leq k_1-1} (t^j/j!)$$

donc si $m = \max_{1 \leq i \leq r} k_i$

$$31) \quad ||e^{At}|| \leq m ||x|| ||x^{-1}|| e^{\alpha(A)t} \max_{0 \leq j \leq m-1} (t^j/j!)$$

La forme de Souriau de $(zI-A)^{-1}$ et l'intégrale de Cauchy peuvent donner aussi origine a une borne de la norme de l'exponentielle d'une matrice qui tient compte de $\alpha(A)$.

Le lemme 1 nous dit que :

$$32) \quad e^{At} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (zI-A)^{-1} e^{zt} dz$$

où Γ est une courbe fermée de Jordan de $\mathbb{C}$ qui entoure les valeurs propres de A .

La forme de Souriau nous permet d'écrire :

$$33) \quad e^{At} = \sum_{i=0}^{N-1} A_i \sum_{p=1}^r \operatorname{Res} \left(\frac{e^{zt} z^{N-i-1}}{r \prod_{p=1}^r (z-\lambda_p)^{k_p}}, \lambda_p \right)$$

où $\sigma(A) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_r\}$ et la multiplicité de λ_i en tant que valeur propre de A est k_i .

Donc :

$$34) \quad ||e^{At}|| \leq \sum_{i=0}^{N-1} ||A_i|| \sum_{p=1}^r \left| \operatorname{Res} \left(\frac{e^{zt} z^{N-i-1}}{r \prod_{\ell=1}^r (z-\lambda_{\ell})^{k_{\ell}}}, \lambda_p \right) \right|$$

On va étudier un petit exemple pour voir plus clair sur les possibilités de ces trois bornes pour représenter le comportement de la norme de l'exponentielle d'une matrice.

Soit A la matrice :

$$A = \begin{bmatrix} -1+\delta & 4 \\ 0 & -1-\delta \end{bmatrix} \quad \delta = 10^{-6}$$

La borne donnée en 25) nous dit que :

$$i) \quad ||e^{At}||_2 \leq e^{(-1+\delta)t} (1+4t), \quad t \geq 0$$

Celle donnée en 32) que :

$$ii) \quad ||e^{At}||_2 \leq e^{(-1+\delta)t} (4.10^6) ; \quad t \geq 0$$

et de 34) on peut conclure que :

$$iii) \quad ||e^{At}||_2 \leq 4.5 \cdot 10^6 e^{(-1+\delta)t} (1-e^{-2t}) ; \quad t \geq 0$$

t	$ e^{At} $	i	ii	iii
0	1.0E+000	1.0E+00	4.0E+06	4.5E+06
5	1.3E-01	1.4E-01	2.7E+04	2.8E+00
10	1.8E-03	1.9E-03	1.8E+02	3.6E-03
15	1.8E-05	1.9E-05	1.2E+00	3.6E-05
20	1.6E-07	1.7E-07	8.2E-03	3.3E-07
25	1.3E-09	1.4E-09	5.6E-05	2.8E-09
30	1.1E-11	1.1E-11	3.7E-07	1.2E-11

Ces trois bornes ne sont pas évidemment les seules que l'on puisse trouver dans la littérature. Dans Van Loan [32] on trouve 25), 32) et une multitude d'autres. Mais les bornes étudiées ici sont celles qui suivent le comportement de la norme de l'exponentielle d'une matrice avec plus de précision.

7. "Sensibilité" du problème

Pour étudier les performances de certains algorithmes, pour calculer l'exponentielle d'une matrice on est conduit à étudier le comportement de l'exponentielle de At ; A matrice réelle, $N \times N$, $t \geq 0$ quand on perturbe A .

On va examiner tout d'abord un exemple que donne une idée claire du problème.

Soit A une matrice normale, $N \times N$, telle que $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.

Supposons aussi que les valeurs propres de A sont simples. On les indexe de façon à avoir :

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_N$$

Soit B une matrice telle que les valeurs propres de A+B soient simples et $\lambda_N < \mu_N$, ($\mu_i \in \sigma(A+B)$) alors :

$$i) \quad e^{\lambda_N t} = \|e^{At}\|_2$$

$$ii) \quad \frac{\|e^{(A+B)t} - e^{At}\|_2}{\|e^{At}\|_2} \quad \text{tend vers l'infini comme l'exponentielle de } ct ; c \geq 0;$$

lorsque t tend vers l'infini.

Démonstration :

On étudie donc la différence relative entre l'exponentielle de A+B, B une matrice que l'on suppose la perturbation de A, et l'exponentielle de A. C'est-à-dire que l'on calcule :

$$35) \quad \theta(t) = \frac{\|e^{(A+B)t} - e^{At}\|_2}{\|e^{At}\|_2}$$

Si on utilise la forme de Sauriau (Lemme) et le théorème des résidus on obtient que :

$$\begin{aligned} \theta(t) &= \frac{1}{e^{\lambda_N t}} \left\| \sum_{k=0}^{N-1} C_k \sum_{p=1}^N \frac{\mu_p^{N-k-1} e^{\mu_p t}}{\prod_{i \neq p} (\mu_p - \mu_i)} - \sum_{k=0}^{N-1} A_k \frac{\lambda_p^{N-k-1} e^{\lambda_p t}}{\prod_{i \neq p} (\lambda_p - \lambda_i)} \right\|_2 \\ &= \left\| \sum_{k=0}^{N-1} C_k \sum_{p=1}^N \frac{\mu_p^{N-k-1} e^{(\mu_p - \lambda_N)t}}{\prod_{i \neq p} (\mu_p - \mu_i)} - \sum_{k=0}^{N-1} A_k \frac{\lambda_p^{N-k-1} e^{(\lambda_p - \lambda_N)t}}{\prod_{i \neq p} (\lambda_p - \lambda_i)} \right\|_2 \end{aligned}$$

Mais on trouve que :

$$\left\| \sum_{k=0}^{N-1} C_k \sum_{p=1}^N \frac{\mu_p^{N-k-1} e^{(\mu_p - \lambda_N)t}}{\prod_{i \neq p} (\mu_p - \mu_i)} \right\|_2 \quad \text{tend vers l'infini lorsque t tend vers}$$

l'infini comme $e^{(\mu_N - \lambda_N)t}$.

$$\left\| \sum_{k=0}^{N-1} A_k \sum_{p=1}^N \lambda_p^{N-k-1} \frac{e^{(\lambda_p - \lambda_N)t}}{\prod_{i \neq p} (\lambda_p - \lambda_i)} \right\|_2 \text{ tend vers } \left\| \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\lambda_N^{N-k-1} A_k}{\prod_{i \neq p} (\lambda_p - \lambda_i)} \right\|_2$$

quantité finie.

Donc $\theta(t)$ tend vers l'infini lorsque t tend vers l'infini.

Cette remarque démontre que, même dans les conditions a priori favorables d'une matrice normale à valeurs propres simples, on ne peut pas donner une borne de $\theta(t)$ plus petite que e^{ct} où $c \geq 0$, sans faire de restriction très fortes sur les valeurs propres de $A+B$, c'est-à-dire sur B .

On va donc étudier ce problème et donner une borne de

$$36) \quad \phi(t) = \frac{\|e^{(A+B)t} - e^{At}\|}{\max\{\|e^{(A+B)t}\|, \|e^{At}\|\}}$$

Il est évident que si A et B commutent alors :

$$\phi(t) \leq t \|B\| e^{\|B\|t}$$

Van Loan [32] a pu démontrer que si A est normale

$$\theta(t) = \frac{\|e^{(A+B)t} - e^{At}\|_2}{\|e^{At}\|_2} \leq t \|B\|_2 e^{\|B\|_2 t}$$

C'est-à-dire que le problème est moins "sensible" dans les cas d'une matrice normale.

On va démontrer que $\phi(t)$ est borné par un polynôme en t d'un degré que l'on peut majorer. Dans le cas où A a des valeurs propres simples et telle que A , $A+B$ n'ont pas des valeurs propres communes la forme de $\phi(t)$ donnée est une constante.

Tout d'abord on introduit le lemme préliminaire.

Lemme 3

Soit $f : \mathbb{C} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ définie par :

$$37) \quad f(z, t) = \frac{z^\ell e^{zt}}{\prod_{i=1}^N (z - \lambda_i)} \quad , \quad \lambda_i \in \mathbb{C}$$

Alors $\frac{d^k}{dz^k} f(z, t) = e^{zt} p(z, t)$ où $p(z, t)$ est un polynôme de degré k en t et le coefficient de t puissance k est $z^\ell / \prod_{i=1}^N (z - \lambda_i)$.

Démonstration

Par récurrence

$$k = 0; \quad f(z, t) = e^{zt} \frac{z^\ell}{\prod_{i=1}^N (z - \lambda_i)}$$

$$k = 1; \quad \frac{df(z, t)}{dz} = \frac{e^{zt}}{\prod_{i=1}^N (z - \lambda_i)} (z^\ell t + \ell z^{\ell-1} - z^\ell \sum_{i=1}^N \frac{1}{(z - \lambda_i)})$$

$$\text{Si } p_1(z, t) = (z t + \ell z^{\ell-1} - z^\ell \sum_{i=1}^N \frac{1}{(z - \lambda_i)}) \text{ est de degré maximal 1 en } t$$

et le coefficient de t est z^ℓ .

Supposons maintenant notre affirmation vraie pour k , voyons par récurrence qu'elle est vraie pour $k+1$.

$$\frac{d^{k+1}}{dz^{k+1}} f(z, t) = \frac{d}{dz} \left(\frac{d^k}{dz} f(z, t) \right) = \frac{d}{dz} \frac{e^{zt}}{\prod_{i=1}^N (z - \lambda_i)} p_k(z, t)$$

où $p_k(z, t)$ est de degré k en t et le coefficient de t puissance k est z^ℓ .

Mais :

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{e^{zt} P_k(z, t)}{\prod_{i=1}^N (z - \lambda_i)} \right) = \frac{\prod_{i=1}^N (z - \lambda_i) (t e^{zt} P_k(z, t) + e^{zt} \frac{d}{dz} P_k(z, t)) - e^{zt} P_k(z, t) \sum_{j=1}^N \prod_{i \neq j}^N (z - \lambda_i)}{\prod_{i=1}^N (z - \lambda_i)^2}$$

$$= \frac{e^{zt}}{\prod_{i=1}^N (z - \lambda_i)} P_{k+1}(z, t)$$

où $p_{k+1}(z, t)$ est de degré $k+1$ en t et le coefficient de t puissance $k+1$ est z^ℓ .

Donc :

$$\frac{d^{k+1}}{dz^{k+1}} f(z, t) = e^{zt} p(z, t)$$

où $p(z, t)$ est de degré maximal $k+1$ en t et le coefficient de t puissance $k+1$ est $z^\ell / \prod_{i=1}^N (z - \lambda_i)$.

Maintenant, on démontre le résultat principal de cette section :

Théorème 4 :

Soient A et B deux matrices $N \times N$ et $\{\lambda_1, \dots, \lambda_r\}$ l'ensemble des valeurs propres de A et $A+B$.

Soit ℓ_i la multiplicité de λ_i en tant que valeur propre de $A+B$.

Soit k_i la multiplicité de λ_i en tant que valeur propre de A .

Si $m_i = k_i + \ell_i$, soit $m = \max_{1 \leq i \leq r} (m_i)$

Alors $\phi(t) \leq \|B\| p(t)$ où $p(t)$ est un polynôme en t de degré au plus $m-1$.

Démonstration

D'après le lemme 1 on a :

$$38) e^{At} - e^{(A+B)t} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} ((zI-A)^{-1} - (zI-A-B)^{-1}) e^{zt} dz$$

où Γ est une courbe simple fermée de Jordan de $\mathbb{C}$ qui entoure les valeurs propres de A et $A+B$.

On trouve que :

$$39) e^{At} - e^{(A+B)t} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} (zI-A-B)^{-1} B(zI-A)^{-1} e^{zt} dz$$

Si on utilise maintenant la forme de Souriau on a :

$$40) (zI-A-B)^{-1} = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{z^{N-k-1}}{C_1(z)} D_k \quad (D = A+B)$$

$$\text{où } C_1(z) = \det(zI-A-B)$$

$$41) (zI-A)^{-1} = \sum_{\ell=0}^{N-1} \frac{z^{N-\ell-1}}{C_2(z)} A_{\ell}$$

$$\text{où } C_2(z) = \det(zI-A)$$

Donc :

$$\begin{aligned} e^{At} - e^{(A+B)t} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{e^{zt}}{C_1(z) \cdot C_2(z)} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{\ell=0}^{N-1} D_k B A_{\ell} z^{2N-\ell-k-2} dz \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{\ell=0}^{N-1} D_k B A_{\ell} \sum_{p=1}^r \operatorname{Res} \left(\frac{z^{2N-k-\ell-2} e^{zt}}{\prod_{i=1}^r (z-\lambda_i)}, \lambda_p \right) \end{aligned}$$

Mais si λ_p est de multiplicité $m_p = k_p + \ell_p$

$$\operatorname{Res} \left(\frac{z^{2N-k-\ell-2} e^{zt}}{\prod_{i=1}^r (z-\lambda_i)}, \lambda_p \right) = \frac{1}{(m_p-1)!} \frac{d^{m_p-1}}{dz^{m_p-1}} \left[\frac{z^{2N-k-\ell-2} e^{zt} (z-\lambda_p)^{m_p}}{\prod_{i=1}^r (z-\lambda_i)} \right]_{z=\lambda_p}$$

Donc d'après le lemme 3 :

$$e^{At} - e^{(A+B)t} = \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} D_k B A_l \sum_{p=1}^r \frac{e^{\lambda_p t}}{(m_p-1)!} p_{l,k}(\lambda_p, t)$$

$$\text{où } p_{l,k}(\lambda_p, t) = \frac{1}{\prod_{i=1, i \neq p}^r (\lambda_p - \lambda_i)} (\lambda_p^{2N-k-l-2} t^{m_p-1} + q_{l,k}(\lambda_p, t))$$

c'est-à-dire $p_{l,k}(\lambda_p, t)$ est de degré maximal m_p-1 en t .

Si on considère maintenant les normes :

$$\|e^{At} - e^{(A+B)t}\| \leq \sum_{p=1}^r \frac{|e^{\lambda_p t}|}{(m_p-1)!} \left\| \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} D_k B A_l p_{l,k}(\lambda_p, t) \right\|$$

Puisque $|e^{\lambda_p t}| \leq \text{Max} \{ \|e^{(A+B)t}\|, \|e^{At}\| \}$ (Théorème 2)

$$\phi(t) = \frac{\|e^{At} - e^{(A+B)t}\|}{\text{Max} \{ \|e^{At}\|, \|e^{(A+B)t}\| \}} \leq \|B\| \sum_{p=1}^r \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} \|D_k\| \|A_l\| p_{l,k}(\lambda_p, t)$$

Maintenant si $p_{l,k}(\lambda_p, t) = \sum_{i=0}^S n_i t^i$ on note

$$p_{l,k}(\lambda_p, t) = \sum_{i=0}^S |n_i| t^i$$

$$43) \text{ et } p(t) = \sum_{p=0}^r \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} \|D_k\| \|A_l\| p_{l,k}(\lambda_p, t)$$

Alors $p(t)$ est un polynôme en t de degré maximal $m-1$.

$$\text{Donc } \phi(t) \leq \|B\| p(t)$$

Ce qui démontre notre résultat.

On va faire quelques remarques sur des cas particuliers.

Remarques :

1) Dans la pratique B est une perturbation de A due aux erreurs de calcul.

On aura donc que pour $t < t_0$, Bt est telle que

$$||e^{At}|| \approx ||e^{(A+B)t}||$$

2) Si $\alpha(A+B) \leq \alpha(A)$ où $\alpha(C) = \max\{\operatorname{Re}(\lambda)/\lambda \in \sigma(C)\}$, on aura que :

$$\theta(t) = \frac{||e^{(A+B)t} - e^{At}||}{||e^{At}||} \leq ||B|| p(t)$$

où $p(t)$ est donné dans le théorème 4.

La démonstration est la même que pour le théorème 4, mais on tient compte du fait que :

$$e^{\alpha(A)t} \leq ||e^{At}||$$

3) Pendant la démonstration du théorème 4 on remarque que le rôle joué par A et A+B est tout à fait symétrique.

On peut donc donner un nouvel énoncé du théorème en écrivant :

Soient A et D deux matrices $N \times N$ et $\{\lambda_1, \dots, \lambda_r\}$ l'ensemble des valeurs propres de A et D.

Soit ℓ_i la multiplicité de λ_i en tant que valeur propre de A.

Soit k_i la multiplicité de λ_i en tant que valeur propre de D.

Si $m_i = k_i + \ell_i$; soit $m = \max(m_i)_{1 \leq i \leq r}$

Alors :

$$\phi(t) = \frac{||e^{At} - e^{Dt}||}{\max\{||e^{At}||, ||e^{Dt}||\}} \leq ||A-D|| p(t) \quad \text{où } p(t)$$

est un polynôme en t de degré au plus m-1.

Corollaire 1

S'il existe λ_p telle que $m_p = m$ et $\lambda_p \neq 0$, alors $p(t)$ est un polynôme en t strictement de degré m-1.

Démonstration

Du lemme 3 et du théorème 4 on déduit que le coefficient en t^{m-1} de $p(t)$ est :

$$44) \quad \sum_{\substack{r \\ p=1 \\ m_p=m}} \frac{1}{(m_p-1)!} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{\ell=0}^{N-1} \frac{|\lambda_p^{2N-\ell-k-2}|}{\left| \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq p}}^r (\lambda_p - \lambda_i) \right|} \|D_k\| \|A_\ell\|$$

qui est différent de 0 s'il existe λ_p telle que $m_p = n$ et $\lambda_p \neq 0$ car $D_0 = I$ et $A_0 = I$.

Corollaire 2 :

Soit A telle que ses valeurs propres sont simples et telle que $\sigma(A) \cap \sigma(A+B) = \emptyset$; alors $\phi(t) \leq \text{constante}$.

Démonstration :

C'est un cas particulier du théorème 4.

Si on examine la démonstration du théorème dans les cas particuliers du corollaire 2 on a :

$$\phi(t) = \frac{\|e^{At} - e^{(A+B)t}\|}{\max\{\|e^{At}\|, \|e^{(A+B)t}\|\}} \leq \|B\| \sum_{p=1}^r \frac{1}{\left| \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq p}}^r (\lambda_p - \lambda_i) \right|} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{\ell=0}^{N-1} \|D_k\| \|A_\ell\| |\lambda_i^{2N-\ell-k-2}|$$

Ce qui met en évidence que la distance entre les valeurs propres est un facteur important dans l'étude de la sensibilité de l'exponentielle d'une matrice aux perturbations numériques de la matrice.

Exemple :

$$\text{Si } A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} ; \quad B = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\text{alors } A + B = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} , \quad \sigma(A) = \{1, 2\} , \quad \sigma(A+B) = \{1, 2\}$$

Si on calcule la forme de Souriau on a :

$$A_0 = I \quad \text{et} \quad A_1 = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$D_0 = I ; \quad D_1 = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$$

Alors d'après la démonstration du théorème :

$$\phi_{\infty}(t) \leq \left\| \sum_{p=1}^2 \sum_{k=0}^1 \sum_{\ell=0}^1 A_k^{BD} \ell \operatorname{Res}_{\lambda_p} \frac{z^{2-\ell-k} e^{zt}}{\prod_i (z-\lambda_i)^2} \right\|_{\infty} < 27 \text{ pour } t \geq 0$$

$$\text{Mais } \|e^{At}\|_{\infty} = e^{2t} \quad \text{et} \quad \phi_{\infty}(t) = 3 - 3e^{-t} \quad t \geq 0$$

Borne très grossière mais qui met en évidence la stabilité du problème.

$$\text{On remarque aussi que } \|e^{(A+B)t} - e^{At}\|_{\infty} = 3e^t(e^t - 1)$$

et par la méthode utilisée dans le théorème on obtient :

$$\|e^{(A+B)t} - e^{At}\|_{\infty} \leq 27e^{2t}$$

CHAPITRE 2

APPROXIMANTS DE PADÉ DE L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE

1. RAPPEL SUR LES APPROXIMANTS DE PADÉ. DÉFINITION [22]

On va introduire dans ce chapitre un outil pour l'approximation des fonctions qui est actuellement très répandu .

Définition 1

Soit F une série formelle donnée par :

$$F(z) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i z^i ; \quad a_i \in \mathbb{C}$$

On appelle approximants de Padé de F de type $[p/q]$ la fraction rationnelle écrite sous forme réduite :

$$g_{pq}(z) = n_{pq}(z)/d_{pq}(z)$$

où

- a) le degré de $n_{pq}(z) \leq p$
- b) le degré de $d_{pq}(z) \leq q$ et $d_{pq}(0) = 1$
- c) $d_{pq}(z) F(z) - n_{pq}(z) = O(z^{p+q+1})$

Cette fraction est bien définie en $\mathbb{C}$, sauf dans les racines de l'équation $d_{pq}(z) = 0$, même si le rayon de convergence de F est nul.

Il est possible d'écrire la caractérisation c) de la définition 1 de la façon suivante :

Si

$$1) \quad n_{pq}(z) = \sum_{i=0}^p n_i z^i \quad \text{et} \quad d_{pq}(z) = \sum_{i=0}^q d_i z^i$$

on trouve que :

$$2) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{i)} \quad \sum_{i=0}^q a_{k-i} d_i = -n_k \quad \text{si } k = 0, \dots, p \\ \text{ii)} \quad \sum_{i=0}^q a_{k-i} d_i = 0 \quad \text{si } k = p, \dots, p+q \end{array} \right.$$

où $a_i = 0 \quad \text{si } i < 0$

Donc l'existence des Approximants de Padé d'une fonction F est liée à l'existence d'une solution du système 2), l'unicité est assurée par la condition dite de normalisation $d_{pq}(0) = 1$.

Le système 2) donne aussi un moyen de calcul des approximants de Padé d'une série Formelle F , mais on trouve les inconvénients et le coût de calcul d'un système linéaire.

M. Bussonnais [36] a développé des algorithmes bien plus intéressantes pour calculer une suite des Approximants de Padé d'une série Formelle F .

On peut remarquer que si $F(x) \neq 0$, alors l'approximant de Padé de type $[p/q]$ de $(1/F)$ est l'inverse de l'approximant $[p/q]$ de F .

2. APPROXIMANTS DE PADÉ DE LA FONCTION EXPONENTIELLE

Calcul des coefficients

Etant donné qu'on peut représenter la fonction exponentielle par une série entière, de rayon de convergence infini :

$$3) \quad e^z = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{z^i}{i!}$$

On se pose la question de calculer les approximants de Padé de e^x et d'étudier leur convergence.

Hermite [21] a étudié ce problème et il a réussi à trouver une formule explicite des coefficients d'approximants de Padé de l'exponentielle de type $[p/q]$.

M. Hermite et M. Padé [22] ont remarqué que si $F(t)$ est un polynôme en t de degré m et :

$$4) \quad \mathcal{F}(t) = \frac{F(t)}{z} + \frac{F^{(1)}(t)}{z^2} + \dots + \frac{F^{(m)}(t)}{z^{m+1}}$$

alors

$$5) \quad \int e^{-tz} F(t) dt = -e^{-tz} \mathcal{F}(t)$$

Si on définit maintenant deux polynômes en z :

$$6) \quad \phi_0(z) = F(0) z^m + F^{(1)}(0) z^{m-1} + \dots + F^{(m)}(0)$$

et

$$7) \quad \phi_1(z) = F(1) z^m + F^{(1)}(1) z^{m-1} + \dots + F^{(m)}(1)$$

Alors on obtient de 5) que :

$$8) \quad \phi_0(z) e^z - \phi_1(z) = z^{m+1} e^z \int_0^1 e^{-zt} F(t) dt$$

Dans le cas des approximants de Padé il faut et il suffit que

i) Le degré de ϕ_0 soit q

ii) Le degré de ϕ_1 soit p

iii) m doit au moins être égal à $p+q$

Donc, il faut et il suffit que :

$$F_{(0)}^{(l)} = 0 \text{ pour } l = 0, \dots, m-q-1$$

et

$$F_{(1)}^{(l)} = 0 \text{ pour } l = 0, \dots, m-p-1$$

Pour que le polynôme $F(t)$ y satisfasse il faut et il suffit que l'on ait :

$$9) \quad F(t) = t^{m-q} (t-1)^{m-p} G(t) \quad \text{où}$$

$G(t)$ est un polynôme en t de degré $p+q-m$.

Mais m doit être au moins égal à $p+q$, donc nécessairement, $m = p+q$ et G est une constante.

Il en résulte, finalement :

$$F(t) = t^p (t-1)^q = (-1)^q t^p (1-t)^q$$

et

$$10) \quad \phi_0(z) = F^{(p+q)}(0) + F^{(p+q-1)}(0)z + \dots + F^{(p)}(0)z^q$$

$$11) \quad \phi_1(z) = F^{(p+q)}(1) + F^{(p+q-1)}(1)z + \dots + F^{(q)}(1)z^p$$

Avec

$$12) \quad e^z - \frac{\phi_1(z)}{\phi_0(z)} = \frac{(-1)^q z^{p+q+1}}{\phi_0(z)} \int_0^1 e^{z(1-t)} (1-t)^q t^p dt$$

Mais de la formule du développement du binôme on tire :

$$13) \quad F(t) = t^p (t-1)^q = t^{p+q} - q t^{p+q-1} + \frac{q(q-1)}{1.2} t^{p+q-2} + \dots + (-1)^q t^p$$

Si on dérive on obtient :

$$14) \quad F^{(p+q-k)}(0) = \frac{(p+q-k)! q(q-1)\dots(q-k+1)}{k!} (-1)^k$$

et

$$15) \quad F^{(p+q-k)}(1) = \frac{(p+q-k)! p(p-1)\dots(p-k+1)}{k!}$$

Donc $\phi_0(z) = (p+q)! d_{pq}(z)$ et $\phi_1(z) = (p+q)! n_{pq}(z)$

Alors on obtient une forme explicite des coefficients des approxi-
mants de Padé de l'exponentielle de type $[p/q]$

$$16) \quad n_{pq}(z) = \sum_{k=0}^p \frac{(p+q-k)! p!}{(p+q)! k! (p-k)!} z^k$$

et

$$17) \quad d_{pq}(z) = \sum_{k=0}^q \frac{(p+q-k)! q!}{(p+q)! k! (q-k)!} (-z)^k$$

On remarque ensuite que $d_{qp}(-z) = n_{pq}(z)$.

3. CONVERGENCE. UNE BORNE D'ERREUR THÉORIQUE DANS LE CAS "SCALAIRE"

On étudiera dans ce paragraphe une borne de l'erreur commise quand on approche e^x par les approximants de Padé, ce problème a été résolu par Varga [19.] et Underhill et Wragg [26].

Si on note :

$$18) \quad R_{pq}(z) = e^z - g_{pq}(z) = e^z - \frac{n_{pq}(z)}{d_{qp}(z)}$$

On tire immédiatement du paragraphe précédent que

$$19) \quad R_{pq}(z) = \frac{(-1)^q z^{p+q+1}}{(p+q)! d_{pq}(z)} \int_0^1 e^{z(1-t)} (1-t)^q t^p dt$$

Maintenant, soit x la partie réelle de z alors :

$$20) \quad \left| \int_0^1 e^{z(1-t)} t^p (1-t)^q dt \right| \leq e^{|x|} \left| \int_0^1 t^p (1-t)^q dt \right|$$

Donc, dans le cercle $|z| < R_0$

$$21) \quad e^{|x|} \left| \int_0^1 t^p (1-t)^q dt \right| \leq e^{R_0} \frac{p! q!}{(p+q+1)!}$$

Alors :

$$22) \quad \left| R_{pq}(z) \right| \leq \frac{p! q! R_0^{p+q+1} e^{R_0}}{(p+q)! (p+q+1)!} \frac{1}{|d_{pq}(z)|}$$

Donc on a réduit le problème à l'étude d'une borne pour $|1/d_{pq}(z)|$

Théorème (Saff et Varga [29])

Soit $p \geq 1$ et $q \geq 0$, alors toutes les racines du dénominateur de l'approximant de Padé g_{pq} de la fonction exponentielle sont dans la région du plan complexe définie par :

$$23) \quad (p+q)r < |z| < p+q+4/3$$

où r est l'unique racine positive de $r e^{1+r} = 1$

On peut trouver la démonstration dans [29].

Varga a calculé une approximation numérique de r ;

$$r \approx 0.278465.$$

Donc, si $z_1, \dots, z_q$ sont les q racines de $d_{pq}(z)$ on obtient :

$$24) \quad d_{pq}(z) = \frac{(-1)^q p!}{(p+q)!} \prod_{i=1}^q (z - z_i)$$

Si en plus p et q vérifient $r(p+q) > R_0$

alors :

$$25) \quad |z - z_i| > r(p+q) - R_0 > 0$$

pour $i = 1, \dots, q$.

Cette remarque permet d'obtenir très aisément une borne d'erreur car :

$$26) \quad \left| \frac{1}{d_{pq}}(z) \right| \leq \frac{(p+q)!}{p! (r(p+q) - R_0)^q}$$

pour $|z| < R_0$ et p, q suffisamment grands, donc :

$$27) \quad \left| R_{pq}(z) \right| \leq \frac{e^{R_0} R_0^{p+q+1} q!}{(p+q+1)! (r(p+q) - R_0)^q}$$

On a obtenu une borne d'erreur qui nous permet de choisir un approximant qui nous donnera une précision voulue dans un cercle de rayon R_0 .

Par exemple, si on considère le cas $p = q$ on obtient :

$$28) \quad \left| R_{pq}(z) \right| \leq \frac{e^{R_0} R_0^{2p+1} p!}{(2p+1)! (2p.r - R_0)^p}$$

Pour une précision de 10^{-17} on a :

$$29) \quad \begin{array}{c|cccccccc} R_0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ \hline p & 9 & 12 & 15 & 18 & 21 & 23 & 25 \end{array}$$

Cette table nous met en évidence que l'utilisation des approximants de Padé pour approcher e^z si $|z|$ est grand nous oblige à calculer la valeur d'un polynôme de très haut degré.

4. CALCUL DE L'ERREUR SUR LES DERIVEES

Si on note maintenant :

$$30) \quad R_{pq}^{(j)}(z) = e^z - g_{pq}^{(j)}(z) = (e^z - g_{pq}(z))^{(j)}$$

On cherche à tirer une borne de $R_{pq}^{(j)}$ car cette quantité joue un rôle important dans le calcul de l'erreur dans le cas matriciel.

Le paragraphe précédent nous affirme que si un module de z est plus petit que R_0 , il existe p et q tels que $R_{pq}(z)$ soit analytique dans

l'intérieur du cercle de centre zéro et son rayon R_0 . Alors $R_{pq}^{(j)}(z)$ est aussi analytique dans ce cercle.

Donc le maximum de $R_{pq}^{(j)}(z)$ sur le cercle fermé $|z| \leq R_0$ est obtenu sur la frontière, c'est à dire dans un point $z_0 = R_0 e^{i\theta_0}$ où θ_0 appartient à R .

C'est à dire, si $|z| < R_0$ on obtient :

$$31) \quad |R_{pq}^{(j)}(z)| \leq |R_{pq}^{(j)}(R_0 e^{i\theta_0})| \leq \frac{M(h) j!}{h^j}$$

où $M(h)$ est une borne de $R_{pq}(z)$ dans le cercle

$$|z| < R_0 + h < r(p+q) \quad ; \quad h > 0$$

Donc, on obtient la borne suivante :

$$32) \quad |R_{pq}^{(j)}(z)| \leq \frac{e^{R_0+h} (R_0+h)^{p+q+1} q! j!}{(p+q+1)! (r(p+q)-R_0)^q h^j}$$

où $|z| < R_0 + h < r(p+q) \quad ; \quad h > 0$ et p, q suffisamment grands.

Cette borne est celle donnée dans le paragraphe précédent permet de conclure.

Théorème

Soit g_{pq} l'approximant de Padé de la fonction exponentielle de type p, q . Alors :

$$33) \quad g_{pq}(z) \text{ tends vers } e^{(z)} \text{ lorsque } p \text{ et } q \text{ tendent vers l'infini.}$$

5. "A-ACCEPTABILITE" DES APPROXIMANTS DE PADÉ DE L'EXPONENTIELLE

On a constaté que la fonction exponentielle a la propriété d'être bornée dans la région du plan complexe définie par $\operatorname{Re}(z) \leq 0$.

C'est à dire :

$$\overline{e^z} = |e^z| \leq 1 \quad \text{si } \operatorname{Re}(z) \leq 0.$$

On peut donc voir si cette propriété est retrouvée dans les approximants de Padé de l'exponentielle.

R. Varga [19] a étudié ce problème, il a donné une définition et démontré quelques résultats partiels.

Définition 2

Une fonction $f : \mathbb{C} \longrightarrow \mathbb{C}$ est dite A-"acceptable" si :

$$34) \quad |f(z)| \leq 1 \quad \text{pour tout } z \in \mathbb{C} \quad \text{et } \operatorname{Re}(z) \leq 0$$

On peut donc étudier la A-"acceptabilité" des approximants de Padé de l'exponentielle.

Théorème (M. Crouzeix et F. Ruamps [30])

Si $p = q$, $p = q - 1$, $q - 2$, les Approximants de Padé g_{pq} de la fonction exponentielle sont A-"acceptables".

Démonstration

On veut donc démontrer que si $p = q$; $p = q - 1$, $p = q - 2$

$$\sup |g_{pq}(z)| \leq 1 \quad \text{si } z \in \{z \mid \operatorname{Re}(z) \leq 0\}$$

On fera cette démonstration par induction sur q .

Si $q = 0$ alors $g_{0,0}(z) = 1$, est A-"acceptable".

Soit maintenant :

$$35) \quad E_q = \left\{ (a,b) : (a,b) \in \mathbb{R}^{2q} \text{ et } r(z) = \frac{\sum_{i=1}^q a_i z^i}{\sum_{i=1}^q b_i z^i} = e^z + O(z^{2q-1}) \right. \\ \left. \text{et } a_q < |b_q|, \quad b_q \neq 0, \text{ irréductibles.} \right\}$$

E_q est un convexe donc connexe de $\mathbb{R}^{2q}$.

On démontre maintenant que $r(z)$ est bornée sur l'axe imaginaire :

$$36) \quad |r(iy)|^2 = \frac{1 + \alpha_1 y^2 + \dots + \alpha_q y^{2q}}{1 + \beta_1 y^2 + \dots + \beta_q y^{2q}} = 1 + O(y^{2q-1})$$

Donc on a si $p < q$ $\alpha_1 = \beta_1, \dots, \alpha_{q-1} = \beta_{q-1}$

et $\alpha_q \leq \beta_q$ car $a_q^2 \leq b_q^2$

Alors :

$$37) \quad |r(iy)|^2 \leq 1$$

Soit

$$38) \quad F_q = \{(a,b) ; \text{ telle que } (a,b) \in E_q \text{ et } r(z) \text{ n'a pas de pôles dans } \operatorname{Re}(z) \leq 0\}$$

Mais on a vu que $r(z)$ n'a pas de pôles en $\operatorname{Re}(z) = 0$; alors :

$$39) \quad F_q = \{(a,b) ; \text{ telle que } (a,b) \in E_q \text{ et } r(z) \text{ n'a pas de pôles dans } \operatorname{Re}(z) < 0\}$$

En plus F_q est non vide, car par hypothèse récursive on a que $g_{q-1,q-1}(z)$ appartient à F_{q-1} alors :

$$40) \quad r(z) = \frac{n_{q-1,q-1}(z) (z-1)}{d_{q-1,q-1}(z) (z-1)}$$

est définie telle que ses coefficients appartiennent à F_q .

Donc F_q est un ensemble ouvert et fermé de E_q donc $F_q = E_q$.

Alors si $r(z)$ est telle que ses coefficients appartiennent à E_q , elle est analytique dans un voisinage de $\operatorname{Re}(z) \leq 0$, donc par le principe du maximum $|r(z)| < 1$ dans $\operatorname{Re}(z) \leq 0$.

Alors les approximants de Padé du type (q,q) , $(q-1,q)$ et $(q-2,q)$ sont A-"acceptables".

De cette propriété et du fait que $d_{q,q}(z) = n_{q,q}(z)$ il en résulte l'utilisation dans les applications pratiques des approximants de Padé diagonaux.

6. APPROXIMANTS DE PADÉ DE L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE

Maintenant si on considère les approximants de Padé g_{pq} de la fonction exponentielle, on appelle l'approximant de Padé $g_{pq}(A)$ de l'exponentielle de A , matrice $N \times N$, la matrice :

$$(41) \quad g_{pq}(A) = d_{pq}(A)^{-1} n_{pq}(A) = n_{qp}(-A)^{-1} n_{pq}(A)$$

On note que $n_{pq}(-A)^{-1}$ existe pour p et q suffisamment grands, corollaire du théorème de M. VARGA [29].

Théorème

Soit A une matrice $N \times N$ et $g_{pq}(A)$ l'approximant de Padé de l'exponentielle de A .

Alors $\|e^A - g_{pq}(A)\|$ tends vers zéro lorsque p, q tendent vers l'infini.

Démonstration

Si on écrit $A = T J T^{-1}$, J forme de Jordan de A , alors :

$$(42) \quad \|e^A - g_{pq}(A)\| \leq \|T\| \|T^{-1}\| \|\text{diag}(e^{J_{ki}} - g_{pq}(J_{ki}))\|$$

Mais $J_{ki} = \lambda_{ki} I + M_{ki}$; λ_{ki} valeur propre de A ,

$$\text{et} \quad M_{ki} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 \\ & & 0 \end{bmatrix} ; \quad k_i \times k_i, \quad M_{ki}^{k_i} = 0$$

Donc on trouve :

$$(43) \quad e^{J_{ki}} - g_{pq}(J_{ki}) = \sum_{l=0}^{k_i-1} (e^{\lambda_{ki}} - g_{pq}^{(l)}(\lambda_{ki})) \frac{M_{ki}^l}{l!}$$

Si on note $M = \text{diag} \{M_{ki} ; i=1, \dots, r\}$ on a que :

$$(44) \quad \|\text{diag}(e^{J_{ki}} - g_{pq}(J_{ki}))\| \leq \max_{\substack{\lambda_i \in \sigma(A) \\ 0 \leq l \leq (\max k_i) - 1}} |e^{\lambda_i} - g_{pq}^{(l)}(\lambda_i)| \sum_{k=0}^{(\max(k_i)) - 1} \frac{\|M\|^k}{k!}$$

D'après la borne d'erreur donnée dans la section précédente ; pour tout ε plus grand que zéro il existe p et q suffisamment grands tel que :

$$\max_{\lambda_i \in \sigma(A)} |e^{\lambda_i} - g_{pq}^{(\ell)}(\lambda_i)| < \varepsilon$$

$$0 \leq \ell \leq (\max k_i) - 1$$

Donc $||\text{diag}(e^{J_{ki}} - g_{pq}^{(J_{ki})})||$ tend vers zéro lorsque p et q tendent vers l'infini.

On remarque que cette borne d'erreur théorique dépend de la taille des valeurs propres et du conditionnement de T.

Plus particulièrement on remarque que dans le cas où A est diagonalizable :

$$45) \quad |e^A - g_{pq}(A)|_{ij} \leq \max_{\lambda_i \in \sigma(A)} |e^{\lambda_i} - g_{pq}(\lambda_i)| \sum_{k=1}^N |t_{ik}| |p_{kj}|$$

où $\sum_{k=1}^N |t_{ik}| |p_{kj}|$ est le coefficient (i,j) de $|T| |T^{-1}|$.

Si on utilise maintenant l'intégrale de Cauchy et la forme de Souriau, on obtient :

$$46) \quad ||e^A - g_{pq}(A)|| = \left| \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \sum_{k=0}^{N-1} A_k \frac{z^{N-k-1}}{c(z)} (e^z - g_{pq}(z)) e^{zt} \bar{c}z \right|$$

où $c(z) = \det(zI - A)$ et Γ est une courbe fermée de Jordan de $\mathbb{C}$ qui entoure les valeurs propres de A.

Donc, si $\lambda_1, \dots, \lambda_r$ sont les valeurs propres de A on a :

$$47) \quad ||e^A - g_{pq}(A)|| \leq \left| \sum_{p=1}^r \sum_{k=0}^{N-1} A_k \text{Res} \left(\frac{e^z (e^z - g_{pq}(z))}{\prod_{i=1}^r (z - \lambda_i)} z^{N-k-1}, \lambda_p \right) \right|$$

Si les valeurs propres de A sont simples :

$$48) \quad \frac{||e^A - g_{pq}(A)||}{||e^A||} \leq \sum_{p=1}^N \sum_{k=0}^{N-1} ||A_k|| \frac{|e^{\lambda_p} - g_{pq}(\lambda_p)|}{\prod_{\substack{i=1 \\ p \neq i}}^N |\lambda_p - \lambda_i|} |\lambda_p|^{N-k-1}$$

On remarque encore une fois que l'erreur sur les valeurs propres et la distance des valeurs propres entre eux est un facteur déterminants de l'erreur commise quant on approche l'exponentielle d'une matrice par les approximations de Padé.

Exemple :

$$\text{Si } A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} ; \sigma(A) = \{1, 2\} \quad \text{alors :}$$

$$A_0 = I \quad \text{et} \quad A_1 = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = 2$$

$$||A_0||_1 = 1 ; \quad ||A_1||_1 = 2$$

Si on choisit p et q tels que :

$$|e^1 - g_{pq}(1)| < 10^{-\beta} \quad \text{et} \quad |e^2 - g_{pq}(2)| < 10^{-\beta}$$

où $10^{-\beta}$ est la précision machine, on trouve que :

$$\begin{aligned} \frac{||e^A - g_{pq}(A)||_1}{||e^A||_1} &\leq \sum_{p=1}^2 \sum_{k=0}^1 ||A_k||_1 |\lambda_p|^{2-k-1} 10^{-\beta} \\ &\leq 7 \times 10^{-\beta} \end{aligned}$$

Si on utilise, maintenant les approximations de Padé pour calculer l'exponentielle d'une matrice on rencontre plusieurs difficultés.

Tout d'abord, comme dans les cas de la série de Taylor, le calcul d'un polynôme matriciel de degré élevé est affecté des erreurs d'arrondi

Si on calcule : $n_{pp}(-A)^{-1} \cdot n_{pp}(A)$ pour p suffisamment grand on a que :

$$49) \quad \text{Cond} [n_{pp}(-A)^{-1}] \approx \text{Cond} e^{A/2} \geq e^{(\lambda_{\max} - \lambda_{\min})/2}$$

Donc, les erreurs d'arrondi, et les mauvais conditionnement du système peuvent rendre le calcul non significatif.

Les approximations de Padé peuvent être utilisés directement seulement si $\|A\|$ n'est pas très grande.

7. "A- ACCEPTABILITE" DANS LE CAS MATRICIELLE

On a déjà remarqué que certain approximations de Padé de la fonction exponentielle sont "A-acceptables" dans le cas "scalaire", cette notion peut être étendue au cas matricielle.

Définition 3

Une matrice H est "A-acceptable dans le cas matricielle" si ses valeurs propres sont en module plus petit que un.

On peut étudier maintenant la propriété de "A-acceptabilité matricielle" de certains approximations de Padé de l'exponentielle d'une matrice.

Lemme

Soit H une matrice $N \times N$ telle que ses valeurs propres ont une partie réelle négative alors les matrices $g_{q,q}(H)$, $g_{q-1,q}(H)$, $g_{q-2,q}(H)$ sont "A-acceptables dans le cas matricielle".

Cette propriété est démontrée si on tient compte de :

a) si λ est valeur propre de H alors $g_{p,q}(\lambda)$ est valeur propre de $g_{pq}(H)$

b) $g_{q,q}$, $g_{q-1,q}$, $g_{q-2,q}$ sont "A-acceptables" dans le cas "scalaire".

CHAPITRE 3

USAGE PRATIQUE DE LA MÉTHODE DE PADÉ POUR LE CALCUL DE L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE

1. METHODE DE WARD [33]

On a remarqué dans le chapitre précédent qu'on ne peut pas faire un usage direct des approximants de Padé si le rayon spectrale de la matrice A est très grand.

Une première méthode pour transformer notre problème, de façon à ne pas avoir à calculer en approximants de Padé de très haut degré, consiste à appliquer une propriété bien connue de la fonction exponentielle :

$$1) \quad e^A = e^{\alpha \frac{A}{\alpha}} = \left(e^{\frac{A}{\alpha}} \right)^\alpha$$

On peut donc trouver α tel que $B = A/\alpha$ ait un rayon spectrale plus petit que R, fixe.

Ward [33] a choisi une méthode simple pour calculer α : il détermine la puissance de deux telle que $\|B\| < 0.5$.

Ce choix présente deux avantages : premièrement, α est très facile à calculer et deuxièmement, les polynômes matriciaux se calculent très aisément si la matrice est de norme plus petite que un.

On va décrire maintenant cet algorithme pas à pas.

a) On calcule la trace de A et on pose $A' = A - \text{trace de A}$

b) On "équilibre" A' , c'est-à-dire on calcule une matrice D telle que $A'' = D^{-1} A' D$ ait la propriété d'être en norme plus petite que A' et que les normes des lignes et colonnes soient semblables.

c) On calcule m telle que

$$B = A'' 2^{-m} \text{ avec } \|B\|_1 < 0.5$$

d) On calcule $n_{pp}(B)$ est $n_{pp}(-B)$

e) On calcule $g_{pp}(B) = n_{pp}(-B)^{-1} n_{pp}(B)$

f) On calcule $\overline{e^{A''}} = (g_{pp}(B))^{2^m}$

2)

g) Si on note $\overline{e^A}$ l'exponentielle de A obtenue par l'algorithme, on calcule finalement :

$$3) \quad \overline{e^A} = e^{\text{trace}/N} \overline{e^{A''}} D^{-1}$$

Ward et Van Loan [34] ont étudié cet algorithme pour déterminer l'erreur théorique.

On peut étudier l'erreur théorique d'après la formule d'erreur dans le cas "scalaire" donnée dans le chapitre 2.

$$4) \quad \|e^{B-g_{pp}(B)}\|_{1,\infty} \leq \left\| \frac{(-1)^p B^{2p+1}}{(2p)!} n_{pp}^{-1}(-B) \int_0^1 e^{B(1-t)} (1-t)^p t^p dt \right\|_{1,\infty}$$

$$\leq \frac{\|B\|^{2p+1}}{(2p)!} e^{\|B\|} \|n_{pp}^{-1}(-B)\| \left\| \int_0^1 e^{-tB} (1-t)^p t^p dt \right\|_{1,\infty}$$

$$\leq \|B\|^{2p+1} \frac{e}{2p!} \|B\|_{1,\infty} \|n_{pp}^{-1}(-B)\|_{1,\infty} \int_0^1 (1-t)^p t^p dt$$

Pour borner cette dernière quantité, il faut borner $\|n_{pp}^{-1}(-B)\|_{1,\infty}$

Lemme 1 [34]

$$\text{Si } \|B\| \leq 1/2, \text{ alors } \|n_{pp}^{(+B)}\|_{1,\infty} \leq 1,65 \text{ et } \|n_{pp}^{(-B)}\|_{1,\infty} \leq 2,9$$

Démonstration

$$5) \quad n_{pp}^{(+B)} = \sum_{i=0}^p \frac{(2p-i)! p! (\bar{+B})^i}{2p! (p-i)! i!} = I + \sum_{i=1}^p \frac{(2p-i)! p! (\bar{+B})^i}{2p! (p-i)! i!}$$

Mais

$$\frac{(2p-i)! p!}{2p! (p-i)!} = \frac{p(p-1)\dots(p-i+1)}{2p \dots (2p-i+1)} \leq \frac{p^i}{(2p-i+1)^i}$$

Donc

$$\begin{aligned} \left\| n_{pp}^{-1}(-B) \right\|_{1,\infty} &\leq 1 + \sum_{i=1}^p \frac{p^i}{(2p-i+1)!} \frac{(0.5)^i}{i!} \\ &\leq 1 + \sum_{i=1}^p \frac{(0.5)^i}{i!} \leq 1 + (e^{0.5} - 1) \leq 1.65 \end{aligned}$$

et

$$\left\| n_{pp}^{-1}(-B) \right\|_{1,\infty} = \left\| \left(I + \sum_{i=1}^p \frac{(2p-i)! p!}{2p! (p-i)! i!} (-B)^i \right)^{-1} \right\|_{1,\infty} \leq 2.9$$

Ce lemme nous permet d'en démontrer un autre :

Lemme 2

$$\text{Si } \|B\|_{1,\infty} \leq 1/2, \text{ alors } \|R_{pp}(B)\|_{1,\infty} \leq 3.78 \frac{(p!)^2}{((2p)!(2p+1)!)} \|B\|^{2p+1}$$

Démonstration : D'après le lemme 1, on trouve :

$$\begin{aligned} \|R_{pp}(B)\|_{1,\infty} &= \|e^B - g_{pp}(B)\|_{1,\infty} \leq \frac{3.78}{(2p)!} \left(\int_0^1 (1-t)^p t^p dt \right) \|B\|^{2p+1} \\ 6) \quad &\leq 3.78 \frac{(p!)^2}{(2p)!(2p+1)!} \|B\|^{2p+1} \end{aligned}$$

Le lemme 1 nous permet aussi de donner une idée du conditionnement du système :

$$7) \quad n_{pp}(-B)X = n_{pp}(B)$$

ce qui nous permet de calculer $g_{pp}(B)$.

Lemme 3

Si $\|B\|_{1,\infty} < 0.5$, alors, si on note $K(B)$ le conditionnement du système 7), $K(B)$ est borné par 3.78.

Démonstration

$$\text{Si } K_{1,\infty}(B) = \|n_{pp}^{-1}(-B)\|_{1,\infty} \|n_{pp}(-B)\|_{1,\infty} \leq 3.78$$

Ce lemme nous emmène à dire que notre système est théoriquement bien conditionné.

On va calculer maintenant l'erreur commise théoriquement dans l'ensemble de l'algorithme, c'est-à-dire on va étudier la norme relative d'une matrice E définie par

$$8) \quad (g_{pp}(\frac{A}{2^m}))^{2^m} = e^A e^E$$

Pour trouver la norme de E, il suffit de remarquer que :

$$9) \quad g_{pp}(\frac{A}{2^m}) = e^{\frac{A}{2^m}} e^F$$

d'où on obtient que $E = 2^m F$

Lemme 4 [34]

Si B est une matrice telle que $\|B\|_{1,\infty} \leq 0.5$, alors $g_{pp}(B) = e^B e^F$ où

$$10) \quad \frac{\|F\|}{\|B\|} \leq 8 \|B\|^{2p} \frac{(p!)!}{(2p)!(2p+1)!}$$

Démonstration

Dans la démonstration du lemme 2, on a remarqué que :

$$e^B - g_{pp}(B) = \frac{(-1)^p}{(2p)!} B^{2p+1} n_{pp}^{-1}(-B) \int_0^1 e^{B(1-t)} (1-t)^p t^p dt$$

donc

$$g_{pp}(B) = e^B - \frac{(-1)^p}{(2p)!} B^{2p+1} n_{pp}^{-1}(-B) \int_0^1 e^{B(1-t)} (1-t)^p t^p dt$$

Alors, on peut dire que :

$$e^{-B} g_{pp}(B) = I - e^{-B} \frac{(-1)^p}{(2p)!} B^{2p+1} n_{pp}^{-1}(-B) \int_0^1 e^{B(1-t)} (1-t)^p t^p dt$$

$$= I + H$$

$$\text{où } \|H\|_{1,\infty} \leq \frac{\|B\|^{2p+1}}{(2p)!} \|n_{pp}^{-1}(-B)\| \left\| \int_0^1 e^{-tB} (1-t)^p t^p dt \right\|$$

et d'après le lemme 2, on trouve que :

$$11) \quad \|H\|_{1,\infty} \leq \|B\|^{2p+1} 3.78 \frac{(p!)^2}{(2p)!(2p+1)!} < 1/2$$

Mais B et H commutant, on peut dire que $I + H = e^F$ et $F = \log(I + H)$, d'où il vient :

$$\|F\|_{1,\infty} = \|\log(I+H)\|_{1,\infty} \leq \|H\|_{1,\infty} \frac{1}{1 - \|H\|_{1,\infty}} \leq 2\|H\|_{1,\infty}$$

et, finalement :

$$12) \frac{\|F\|_{1,\infty}}{\|B\|_{1,\infty}} \leq (\|B\|_{1,\infty})^{2p} 8 \frac{(p!)^2}{(2p)!(2p+1)!}$$

Une fois ce lemme démontré, il est possible de conclure :

Corollaire 1

Soit A une matrice $N \times N$ et m un nombre naturel tel que

$2^{-m}\|A\| < 0.5$. Alors :

$$\left[g_{pp} \left(\frac{A}{2^m} \right) \right]^{2^m} = e^A e^E \text{ où}$$

$$13) \frac{\|E\|}{\|A\|} \leq 8 \left(\frac{\|A\|}{2^m} \right)^{2p} \frac{(p!)^2}{(2p)!(2p+1)!}$$

Démonstration

On a déjà remarqué que $E = 2^m F$. De plus, si on note $B = 2^{-m} A$ on obtient :

$$14) \frac{\|E\|}{\|A\|} = \frac{\|2^m F\|}{\|2^m B\|} = \frac{\|F\|}{\|B\|} \leq 8 \left(\frac{\|A\|}{2^m} \right)^{2p} \frac{(p!)^2}{(2p)!(2p+1)!}$$

Les bornes théoriques 6) ou 13), qui sont exactement la même, nous permettent de déterminer à priori le type d'approximants de Padé à calculer pour obtenir une précision voulue au résultat.

Il est bien évident que jusqu'ici, on n'a pas étudié l'erreur d'arrondi produite pendant le calcul. La table qu'on propose est donc valable du point de vue théorique seulement.

$\frac{\ A\ }{\epsilon}$	10^{-3}	10^{-6}	10^{-9}	10^{-12}	10^{-15}
10^{-2}	(2,0)	(4,0)	(5,0)	(7,0)	(8,0)
10^{-1}	(2,0)	(4,0)	(5,0)	(7,0)	(8,0)
10^0	(2,1)	(4,1)	(5,1)	(7,1)	(8,1)
10	(3,5)	(4,5)	(5,5)	(7,5)	(8,5)
10^2	(3,8)	(4,8)	(5,8)	(7,8)	(8,8)
10^3	(3,11)	(4,11)	(5,11)	(7,11)	(8,11)

Le couple (p,m) est donné de telle façon que p est le degré de l'approximant de Padé à utiliser et m est la puissance de 2 qui sert de facteur à l'échelle.

2. MÉTHODE PAR TRANSFORMATION DU SPECTRE

Cette méthode utilise la même propriété de la fonction exponentielle déjà utilisée dans celle de Ward.

Toutefois, on essaie de diminuer le nombre de multiplications à effectuer dans la partie f) de l'algorithme de Ward.

Pour y parvenir, sans avoir à calculer des polynômes matriciaux de haut degré, on contrôle seulement l'erreur sur les valeurs propres de la matrice A.

Autrement dit, on détermine α et β tels que le rayon spectrale de $A'' = \alpha(A - \beta I)$ soit plus petit que un et on choisit l'approximant de Padé qu'approche avec la précision voulue l'exponentielle des valeurs propres de A'' .

Cette méthode permet de faire un nombre plus petit de multiplications dans le § f), mais elle introduit le problème du calcul de α et β .

On va décrire maintenant l'algorithme pas à pas.

a) On calcule de façon grossière $\tilde{\lambda}_{\max}$ et $\tilde{\lambda}_{\min}$ par la méthode de Arnoldi ou autre. (Saad [20]).

$$\frac{\sigma(A)}{\tilde{\lambda}_{\min} \quad \tilde{\lambda}_{\max}}$$

b) On trouve deux nombres $\underline{a}$ et $\underline{b}$ tels que :

$$i) \underline{a} \leq \tilde{\lambda}_{\min} \quad \text{et} \quad \underline{b} \geq \tilde{\lambda}_{\max}$$

ii) $(\underline{b} - \underline{a})/2$ soit un nombre naturel.

Si $\alpha = 2 / (\underline{b} - \underline{a})$ et $\beta = (\underline{b} + \underline{a})/2$, alors le rayon spectrale de $\alpha(A - \beta I)$ est plus petit que un.

En plus, on trouve que :

$$15) \quad \frac{1}{\alpha} = \frac{\tilde{\lambda}_{\max} - \tilde{\lambda}_{\min}}{2} \leq \|A\|_{1,\infty}$$

c) soit $A' = \alpha(A - \beta I)$; on calcule alors :

$$16) \quad g_{pp}(A') = n_{pp}(-A')^{-1} n_{pp}(A')$$

d) On calcule :

$$17) \quad e^{\bar{A}} = e^{\beta} (g_{pp}(A'))^{1/\alpha}$$

D'après 15) on trouve que dans le dernier pas de la méthode, on fait moins de multiplications matricielles.

On va faire maintenant la même analyse d'erreur théorique qu'on a fait pour la méthode de Ward, mais il faut tenir en compte que la norme un ou infinie de A' n'est pas nécessairement plus petite que un.

Lemme

Soit A une matrice $N \times N$ telle que $\rho(A) \leq 1$ et que toutes ses valeurs propres soient simples ou semi-simples.

Si on écrit $A = X D X^{-1}$ et on note $K_{1,\infty}(X) = \|X\|_{1,\infty} \|X^{-1}\|_{1,\infty}$

alors

$$18) \quad \|n_{pp}^{+}(-A)\|_{1,\infty} \leq K_{1,\infty}(X) 1,65$$

$$\|n_{pp}^{-1}(-A)\|_{1,\infty} \leq K_{1,\infty}(X) 2,9$$

Démonstration

D'après l'hypothèse, on peut écrire $A = X D X^{-1}$, D matrice diagonale, d'où il vient :

$$\|n_{pp}^{+}(-A)\|_{1,\infty} \leq \|X\|_{1,\infty} \|X^{-1}\|_{1,\infty} \max_{\lambda_i \in \sigma(A)} |n_{pp}^{+}(\lambda_i)|$$

et

$$\|n_{pp}^{-1}(-A)\|_{1,\infty} \leq \|X\|_{1,\infty} \|X^{-1}\|_{1,\infty} \max_{\lambda_i \in \sigma(A)} |n_{pp}^{-1}(\lambda_i)|$$

Mais $e(A)^p \leq 1$ et d'après le lemme 1, on a :

$$|n_{pp}^{+}(\lambda_i)| \leq 1.65 \text{ et } |n_{pp}^{-1}(\lambda_i)| \leq 2.9$$

D'où il en résulte :

$$\|n_{pp}^{+}(-A)\|_{1,\infty} \leq K_{1,\infty}(X) 1.65 \text{ et } \|n_{pp}^{-1}(-A)\|_{1,\infty} \leq K_{1,\infty}(X) 2.9$$

Cela démontre notre lemme, qui donne aussi une borne du conditionnement du système :

$$19) \quad n_{pp}(-A')^H = n_{pp}(A')$$

On trouve donc :

$$20) \quad \left\| \left| n_{pp}^{-1}(\bar{A}) \right\|_{1,\infty} \left\| n_{pp}(-A) \right\|_{1,\infty} \leq K_{1,\infty}(X)^2 \times 4,785$$

Maintenant, on considère une borne donnée dans le chapitre 2.

Lemme

Soit A une matrice de taille NxN telle que $\rho(A) \leq 1$ et que toutes ses valeurs propres soient simples ou semi-simples. Alors :

$$21) \quad \left| e^A - g_{pp}(A) \right|_{i,j} \leq \frac{2.9 (p!)^2}{(2p)!(2p+1)!} \sum_{k=1}^N |t_{ik}| |p_{kj}|$$

où $\sum_{k=1}^N |t_{ij}| |p_{kj}|$ est le coefficient (i,j) de $|X| |X^{-1}|$

Démonstration

Par hypothèse on peut écrire $A = X D X^{-1}$, D diagonale. D'après la borne d'erreur 45 du chapitre 2), on trouve que :

$$\left| e^A - g_{pp}(A) \right|_{i,j} \leq \max_{\lambda_i \in \sigma(A)} \left| e^{\lambda_i} - g_{pp}(\lambda_i) \right| \sum_{k=1}^N |t_{ik}| |p_{kj}|$$

où $|t_{ik}|$ est le coefficient (i,k) de $|X|$ et $|p_{kj}|$ le coefficient (k,j) de $|X^{-1}|$.

Alors, si on tient compte de l'hypothèse $\rho(A) \leq 1$, on obtient :

$$\left| e^A - g_{pp}(A) \right|_{ij} \leq \frac{2.9 (p!)^2}{(2p)!(2p+1)!} \sum_{k=1}^N |t_{ik}| |p_{kj}|$$

Cette borne d'erreur montre que cette méthode est fort avantageuse si les coefficients de $|X| |X^{-1}|$ sont petits.

Maintenant, si l'on revient à la norme un ou infinie, on trouve :

Lemme

Soit A une matrice de taille NxN telle que $\rho(A) \leq 1$ et que toutes ses valeurs propres soient simples ou semi-simples. Alors :

$$22) \quad \left\| e^A - g_{pp}(A) \right\|_{1,\infty} \leq \frac{2.9 (p!)^2}{(2p)!(2p+1)!} K_{1,\infty}(X)$$

Démonstration

Dans le chapitre 2, on a trouvé que, si A est diagonale, on peut dire que :

$$\left\| e^A - g_{pp}(A) \right\|_{1,\infty} \leq \max_{\lambda_i \in \sigma(A)} \left| e^{\lambda_i} - g_{pp}(\lambda_i) \right| K_{1,\infty}(X)$$

Mais $\rho(A) \leq 1$, d'où il vient :

$$\|e^A - g_{pp}(A)\|_{1,\infty} \leq \frac{2.9 (p!)^2}{(2p)!(2p+1)!} K_{1,\infty}(X)$$

Cette borne est la plus raisonnable qu'on puisse trouver pour ce problème, car elle dépend de la façon la plus simple du conditionnement de X et du fait que $\rho(A) \leq 1$.

Lemme

Soit A une matrice de taille $N \times N$ avec des valeurs propres simples où semi-simples. Alors, si α est telle que $\rho(A/\alpha) \leq 1$,

$$(g_{pp}(A/\alpha))^{1/\alpha} = e^A e^E$$

où

$$23) \quad \frac{\|E\|_{1,\infty}}{\|A\|_{1,\infty}} \leq K_{1,\infty}(X) \frac{9 (p!)^2}{(2p)!(2p+1)!}$$

Démonstration

Suivant la définition des approximants de Padé, on peut écrire :

$$e^{A/\alpha} - g_{pp}(A/\alpha) = O((A/\alpha)^{2p+1})$$

donc

$$g_{pp}(A/\alpha) = e^{A/\alpha} - O((A/\alpha)^{2p+1})$$

c'est-à-dire

$$\begin{aligned} e^{-A/\alpha} g_{pp}(A/\alpha) &= I - e^{-A/\alpha} O((A/\alpha)^{2p+1}) = I - e^{-A} (e^A - g_{pp}(A)) = \\ &= X (I - \text{diag}\{e^{-\lambda_1} (e^{\lambda_1} - g_{pp}(\lambda_1))\}) X^{-1}; \lambda_1 \text{ valeurs propres de } A/\alpha \\ &= X (\text{diag}\{e^{-\lambda_1} g_{pp}(\lambda_1)\}) X^{-1} \end{aligned}$$

Mais

$$\begin{aligned} e^{-\lambda_1} g_{pp}(\lambda_1) &= 1 - e^{-\lambda_1} \frac{(-1)^p \lambda_1^{2p+1}}{(2p)!} n_{pp}^{-1} (-\lambda_1) \int_0^1 e^{\lambda_1(1-t)} (1-t)^{p-1} dt \\ &= 1 + h(\lambda_1) \end{aligned}$$

où

$$|h(\lambda_i)| \leq \frac{|\lambda_i|^{2p+1}}{(2p)!} \left| n_{pp}^{-1}(-\lambda_i) \right| \left| \int_0^1 e^{-t\lambda_i} (1-t)^p t^p dt \right|$$

$$\leq |\lambda_i|^{2p+1} \cdot 9 \frac{(p!)^2}{(2p)!(2p+1)!} \leq 0.5 \text{ si } p \geq 1$$

On peut donc écrire :

$$g_{pp}(\lambda_i) = e^{\lambda_i + \varepsilon_i} \text{ où } 1 + h(\lambda_i) = e^{\varepsilon_i}$$

Il vient alors :

$$|\varepsilon_i| = |\log(1+h(\lambda_i))| \leq |h(\lambda_i)| \frac{1}{1-|h(\lambda_i)|} \leq 9 \frac{|\lambda_i|^{2p+1} (p!)^2}{(2p)!(2p+1)!}$$

C'est-à-dire

$$e^{-A/\alpha} g_{pp}(A/\alpha) = e^F \text{ où}$$

$$F = X \operatorname{diag} \{ \varepsilon_i \} X^{-1}$$

On écrit alors :

$$\|F\|_{1,\infty} \leq K_{1,\infty}(X) \max_{1 \leq i \leq N} |\varepsilon_i| = K_{1,\infty}(X) |\varepsilon_{i_0}|$$

D'où on déduit :

$$\frac{\|F\|_{1,\infty}}{\|A/\alpha\|_{1,\infty}} \leq K_{1,\infty}(X) \times \frac{|\varepsilon_{i_0}|}{|\lambda_{i_0}|} \text{ car } \|A\|_{1,\infty} \geq |\lambda_{i_0}|$$

$$24) \leq K_{1,\infty}(X) \frac{9 (p!)^2}{(2p)!(2p+1)!}$$

Maintenant on considère :

$$e^{-A} g_{pp}(A) = e^E = e^{\alpha F}$$

de 24) on tire que :

$$g_{pp}(A) = e^A e^E$$

D'où il en résulte :

$$\frac{\|E\|_{1,\infty}}{\|A\|_{1,\infty}} \leq K_{1,\infty}(X) \frac{9 (p!)^2}{(2p)!(2p+1)!}$$

Cela démontre le lemme.

On remarque alors que la méthode par transformation du spectre garde toutes les bonnes propriétés de la méthode de Ward si la quantité $K(X)$ n'est pas très importante, tout en faisant moins de multiplications matricielles dans la dernière partie de l'algorithme.

3. BORNE DE L'ERREUR D'ARRONDI COMMISE QUAND ON CALCULE L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE PAR LA METHODE DE PADÉ

Dans ce paragraphe on va étudier les erreurs d'arrondi qui se produisent pendant le calcul des approximants de Padé de l'exponentielle d'une matrice.

Le premier pas de l'"équilibre" de la matrice A ne produit pratiquement pas d'erreur, car la matrice D choisie est une matrice diagonale où les coefficients sont des puissances de deux.

Le pas de l'algorithme qui produit les premières erreurs d'arrondi est le pas où on calcule $n_{pp}(-B)$.

On peut effectuer ce calcul par la méthode de Horner. On commencera donc pour étudier l'erreur d'arrondi produite quand on calcule un polynôme matriciel par la méthode de Horner.

Si

$$25) \quad p(x) = \sum_{r=0}^n c_r x^r$$

est un polynôme de degré n , la méthode de Horner matricielle pour évaluer $p(B)$ consiste à utiliser la récurrence suivante :

$$26) \quad \begin{cases} B_{n+1} = 0 \\ B_r = BB_{r+1} + c_r \\ r = n, \dots, 0 \end{cases}$$

et $p(B) = B_0$

Si on note $\bar{B}_r$ le B_r calculé à l'ordinateur, on obtient que :

$$27) \quad \bar{B}_n = \overline{BB_{n+1} + c_n I} = BB_{n+1} + c_n I + M_n = B_n + M_n$$

$$\text{et } \bar{B}_{n-1} = \overline{B\bar{B}_n + c_{n-1} I} = BB_n + c_{n-1} I + BM_n + M_{n-1} = B_{n-1} + BM_n + M_{n-1}$$

Alors, si on continue par cette méthode, on trouve que :

$$\bar{B}_{n-s} = B_{n-s} + B^s M_n + B^{s-1} M_{n-1} + \dots + M_{n-s}$$

et

$$28) \quad \bar{B}_0 = B_0 + B^n M_n + B^{n-1} M_{n-1} + \dots + M_0$$

Il en suit :

$$29) \quad \overline{p(B)} - p(B) = B^n M_n + B^{n-1} M_{n-1} + \dots + M_0$$

où M_i est l'erreur commise pendant le i -ième pas.

Si on considère négligeable l'erreur produite dans l'addition de $c_i I$ à $B\bar{B}_{i+1}$, on trouve que l'erreur M_i commise pendant le i -ième pas est l'erreur produite par le produit matriciel $B\bar{B}_{i+1}$

Donc :

$$30) \quad ||M_i|| \leq ||B|| ||\bar{B}_{i+1}|| 2n \beta^{-t_1} \quad \text{où } \beta^{-t_1} \text{ est la précision machine.}$$

Mais :

$$\begin{aligned} ||B_n|| &= ||c_n I|| = |c_n| \\ ||B_{n-1}|| &= ||B B_n + c_{n-1} I|| \leq ||B|| |c_n| + |c_{n-1}| \\ ||B_{n-2}|| &\leq ||B|| ||B|| |c_n| + ||B|| |c_{n-1}| \\ 31) \quad ||B_0|| &\leq |c_0| + |c_1| ||B|| + \dots + |c_n| ||B||^n \end{aligned}$$

Dans le cas du dénominateur de l'approximant de Padé de e^x , on trouve alors que :

$$32) \quad ||M_i|| \leq ||B|| n_{pp} (||B||) 2n \beta^{-t_i}$$

Donc :

$$33) \quad ||\overline{n_{pp}(B)} - n_{pp}(B)|| \leq n_{pp} (||B||) 2n \beta^{-t_1} \left(\sum_{i=1}^{p+1} ||B||^i \right)$$

Mais, dans la méthode de Ward, $||B|| \leq 1/2$ et $n_{pp} (||B||) \leq 1,65$ alors :

$$34) \quad ||\overline{n_{pp}^{(+B)} - n_{pp}^{(-B)}}|| \leq (4n \times 1.65) \beta^{-t_1}$$

Si l'on considère la méthode de transformation du spectre, on trouve que :

$$||B_n|| = |c_n|$$

$$||B_{n-1}|| \leq ||X|| ||X^{-1}|| n_{pp}(\lambda_i)$$

$$||B_0|| \leq ||X|| ||X^{-1}|| n_{pp}(\lambda_i)$$

Donc :

$$||M_i|| \leq K(X)^2 (1.65) 2n \beta^{-t}$$

Alors, on trouve que :

$$\begin{aligned} 35) \quad ||n_{pp}^{(-B)} - n_{pp}^{(+B)}|| &\leq K(X)^2 (1.65) 2n \beta^{-t_1} \left(\sum_{i=0}^p ||B^i|| \right) \\ &\leq K(X)^3 2np (1.65) \beta^{-t_1} \end{aligned}$$

On remarque donc que la méthode de Ward est très performante au niveau du calcul de numérateur et dénominateur des approximants de Padé. La méthode par transformation du spectre dépend du conditionnement de X.

Si l'on considère maintenant le système :

$$36) \quad n_{pp}^{(-B)} e^{\overline{B}} = n_{pp}^{(B)}$$

On trouve, dans la pratique, que le système qu'on va résoudre réellement est

$$\overline{n_{pp}^{(-B)} e^{\overline{B}}} = \overline{n_{pp}^{(B)}}$$

On a vu que le conditionnement de ce système dans la méthode de Ward n'est pas important, car si $||B||_{1,\infty} \leq 1/2$

$$37) \quad ||n_{pp}^{-1}(-B)||_{1,\infty} ||n_{pp}(B)||_{1,\infty} \leq 4.785$$

Dans la méthode par transformation du spectre on trouve que si $B = X D X^{-1}$, D une matrice diagonale, alors :

$$38) \quad ||n_{pp}^{-1}(-B)||_{1,\infty} ||n_{pp}^{(+B)}||_{1,\infty} \leq (K(X))^2 4.785$$

On verra dans quelques exemples que le conditionnement de $n_{pp}^{(+B)}$ peut être raisonnable pour $K(X)$ très grand.

Exemples

On construit A matrice 8x8 telle que $A = X D X^{-1}$

$$D = \begin{bmatrix} -50 & & & & & & & \\ & -50 & & & & & & \\ & & -50 & & & & & \\ & & & -5 & & & & \\ & & & & -5 & & & \\ & & & & & -5 & & \\ & & & & & & 2 & \\ & & & & & & & 2 \end{bmatrix}$$

On modifie ensuite X de façon à augmenter le conditionnement de A et l'on regarde quel est le conditionnement de $n_{pp}^{(+B)}$ où $p = 9$

Soit A telle que :

$$39) \quad \|A\|_1 \|A^{-1}\|_1 = 919,2139 \times 14,679 \approx 13493,141$$

et

$$\|n_{pp}^{-1}(-\alpha(A-\beta I))\|_1 \|n_{pp}(-\alpha(A-\beta I))\|_1 \approx 12,04 \times 13,35 = 160,734$$

Si maintenant A est telle que :

$$\|A\|_1 \times \|A^{-1}\|_1 \approx 3028,47 \times 36,32 = 109994,03$$

et

$$\|n_{pp}^{-1}(-\alpha(A-\beta I))\|_1 \times \|n_{pp}(-\alpha(A-\beta I))\|_1 \approx 48.86 \times 51.81 = 2531.4366$$

Si encore on change X de façon à trouver

$$\|A\|_1 \|A^{-1}\|_1 \approx 6068.66 \times 60.601 = 367766.86$$

Alors

$$\|n_{pp}^{-1}(-\alpha(A-\beta I))\|_1 \|n_{pp}(\alpha(A-\beta I))\|_1 \approx 55.469 \times 58.335 = 3235.7841$$

Cet exemple nous montre que le conditionnement réel du système peut être très inférieur aux bornes données.

Si maintenant on étudie le même problème par la méthode de Ward, on observe que les bornes théoriques obtenues sont bien supérieures au numéro de conditionnement calculé par l'ordinateur.

Soit A la même matrice donnée en 39). Alors, si m est tel que $\|A/2^m\| \leq 0.5$ on obtient

$$\|n_{99}^{-1}(-A/2^m)\|_1 \|n_{99}(-A/2^m)\|_1 \approx 1.81 \times 1.95 = 3,5295$$

Une fois qu'on a étudié le problème du conditionnement, on considère le fait que le résultat e^B est la solution du système :

$$40) \quad \overline{(n_{pp}(-B) + Q)H} = \overline{n_{pp}(B)}$$

Mais on a déjà remarqué que $\overline{n_{pp}(-B)} = \overline{n_{pp}(B)} + E^{(+,-)}$, où $\|E\|_{1,\infty}$ est donné par 34) dans la méthode de Ward et par 35) dans la méthode par transformation du spectre.

On peut donc écrire :

$$41) \quad (n_{pp}(-B) + E^{(-)} + Q)H = n_{pp}(B) + E^{(+)}$$

Alors

$$\overline{n_{pp}(-B)e^B} - \overline{n_{pp}(B)} = E^{(+)} - (E^{(-)} + Q)\overline{e^B}$$

et

$$\overline{g_{pp}(B)} - g_{pp}(B) = n_{pp}^{-1}(-B) E^{(+)} - n_{pp}^{-1}(-B) (E^{(-)} + Q) \overline{g_{pp}(B)}$$

Si l'on calcule maintenant :

$$42) \quad \frac{\|\overline{g_{pp}(B)} - g_{pp}(B)\|_1}{\|\overline{g_{pp}(B)}\|_1} \leq \frac{\|n_{pp}^{-1}(-B)\|_1}{\|\overline{g_{pp}(B)}\|_1} (\|E^{(+)}\|_1 + \|n_{pp}^{-1}(-B)\|_1 (\|E^{(-)}\|_1 + \|Q\|_1))$$

Il ne nous manque qu'à trouver $\|Q\|_1$:

$$\|\overline{g_{pp}(B)}\|_1 = \|e^{B+F}\|_1 \geq e^{-\|B\|_1} \|F\|_1$$

où $\|F\|_1$ a été calculé dans le paragraphe précédent.

Alors, si l'on suit Wilkinson [11], on trouve que :

$$43) \quad \|Q\|_1 \leq ((2.005) \times N^2 + N^3) g \beta^{-t_1} \quad \text{où } g \text{ est défini comme le plus grand pivot en module et } \beta^{-t_1} \text{ est la précision machine.}$$

Toujours d'après Wilkinson [11], on peut dire que dans la pratique g est de l'ordre de $8 \left\| \overline{g_{pp}}(-B) \right\|_1$

Donc, dans la méthode de Ward, on trouve que :

$$44) \quad \left\| Q \right\|_1 \leq ((2.005 \times N^2 + N^3) \times 8 \times 1.65) \beta^{-t_1}$$

et pour la méthode par transformation du spectre

$$45) \quad \left\| Q \right\|_1 \leq ((2.005 \times N^2 + N^3) \times 8 \times 1.65 \times K(X)) \beta^{-t_1}$$

Alors, si $\left\| B \right\|_1 < 0.5$, on peut affirmer que, si l'on prend p tel que la précision théorique soit de l'ordre de la précision machine, on arrive à :

$$\begin{aligned} \frac{\left\| \overline{g_{pp}}(B) - g_{pp}(B) \right\|_1}{\left\| \overline{g_{pp}}(B) \right\|_1} &\leq (4N \times 1.65) \times 2.9 \times \beta^{-t_1} + 2.9 ((4N \times 1.65) + (2.005 N^2 + N^3) \\ &\quad 8 \times 1.65) \beta^{-t_1} \\ &\leq (38,280 N + 32 N^2 + 16 N^3) \beta^{-t_1} \end{aligned}$$

Etant donné qu'on note $\overline{g_{pp}}(B) = e^{\overline{B}}$, on peut affirmer que, pour p suffisamment grand, on a :

$$\begin{aligned} 46) \quad \frac{\left\| e^{\overline{B}} - e^B \right\|_1}{\left\| e^{\overline{B}} \right\|_1} &\leq \frac{\left\| e^{\overline{B}} - \overline{g_{pp}}(B) \right\|_1}{\left\| \overline{g_{pp}}(B) \right\|_1} + (38,280N + 32 N^2 + 16 N^3) \beta^{-t_1} \\ &\leq (1 + 38,280 N + 32 N^2 + 16 N^3) \beta^{-t_1} \end{aligned}$$

Cette borne est très importante par rapport à l'erreur observée dans la pratique.

Maintenant, si l'on considère la même borne pour la méthode par transformation du spectre, on trouve :

$$\begin{aligned} \frac{\left\| \overline{g_{pp}}(B) - g_{pp}(B) \right\|_1}{\left\| \overline{g_{pp}}(B) \right\|_1} &\leq 2.9 \times K(X)^4 32 N \beta^{-t_1} + 2.9(32 N.K(X)^4 + (2.005 N^2 + N^3) \\ &\quad 8 \times 1.65 K(X) \beta^{-t_1} \\ &\leq (2.9 \times 64 N K(X)^4 + (2.005 N^2 + N^3) \cdot 16 \cdot K(X)) \beta^{-t_1} \end{aligned}$$

Alors, en définitif, on trouve que, si $B = X D X^{-1}$ et $\rho(D) \leq 1$,
alors

$$47) \quad \frac{\|e^B - \overline{e^B}\|_1}{\|\overline{e^B}\|_1} \leq (K(X) + 2.9 \times 64 N K(X)^4 + ((2.005)N^2 + N^3) \times 16 \times K(X))\beta$$

Cette borne d'erreur est aussi très importante par rapport à la réalité.

Mais l'erreur plus importante est en fait celle qui se produit au dernier pas de l'algorithme, c'est-à-dire, lors du calcul des puissances de e^B pour retrouver $e^{A'}$.

Dans la méthode de Ward, le dernier point de l'algorithme consiste à faire :

$$e^{A'} = \overline{(g_{pp} B)}^{2^m} \quad \text{où } B = (D^{-1} (A - \text{trace}(A)/N) D) / 2^m$$

et dans la méthode par transformation du spectre :

$$e^{A'} = \overline{(g_{pp} B)}^{1/\alpha} \quad \text{où } B = (D^{-1} (A - \beta I) D) / \alpha \quad \text{où } \rho(B) < 1.$$

Dans cette dernière méthode, on peut prendre α égal à une puissance de deux, de façon à minimiser le nombre de multiplications matricielles à effectuer. Autrement dit, faire $\alpha = 2^l$ où l sera plus petite ou égale à m .

Si on note :

$$48) \quad L_k = \overline{(g_{pp} B)}^{2^k} - \overline{g(B)}^{2^k}$$

pour $k = 1$, on obtient :

$$49) \quad \|L_1\|_1 \leq 2N \cdot \beta^{-t_1} \|\overline{g_{pp} B}\|_1^2$$

Il en suit donc :

$$50) \quad \|L_k\|_1 \leq 2N \cdot \beta^{-t_1} \|\overline{(g_{pp} B)}^{2^{k-1}}\|_1^2 \leq 2N \cdot \beta^{-t_1} (\|\overline{(g_{pp} B)}^{2^{k-1}}\|_1 + \|L_{k-1}\|_1)$$

Si on néglige les termes en β^{-2t_1} on obtient :

$$51) \quad \|L_k\|_1 \leq 2N \cdot \beta^{-t_1} (\|\overline{(g_{pp} B)}^{2^{k-1}}\|_1^2) \leq 2N \cdot \beta^{-t_1} \|\overline{g_{pp} B}\|_1^{2^k}$$

Donc, il en résulte que l'erreur peut être aussi importante que

$$52) \quad \max_{0 \leq k \leq m} 2^{N\beta} \frac{1}{2^{k-1}} \left(\left\| \frac{1}{g_{pp}(B)} 2^{k-1} \right\|_1^2 \right)$$

même dans le cas où B a des valeurs propres négatives et $\left\| (e^B)^{2^m} \right\|_1$ est très petite.

On remarque ainsi que le dernier pas de l'algorithme contribue largement à l'erreur totale.

On va maintenant donner plusieurs exemples de l'application de ces deux méthodes à l'aide desquelles on remarquera que l'erreur dépend fortement du nombre de multiplications matricielles à faire dans le dernier pas de l'algorithme.

4. EXEMPLE

Maintenant, on va présenter quelques exemples sur l'application de la méthode de Ward et celle de la transformation du spectre.

Soit A la matrice construite de la façon suivante $A = X J X^{-1}$

$$J = \begin{bmatrix} -3 & 1 & & & & & & \\ & -3 & 1 & & & & & \\ & & -3 & & & & & \\ & & & -1 & & & & \\ & & & & -1 & & & \\ & & & & & -20 & 1 & \\ & & & & & & -20 & 1 \\ & & & & & & & -20 \end{bmatrix}$$

Alors, on trouve que A est donnée par :

nat. a				
11.778833333333333	20.4007936507936508	24.3093849206349206	38.9457738095238095	-62.1053742677426686
-68.4764936067019400	-60.3826671977713644	-54.5476829304954395		
13.1180555555555556	14.2068452380952381	22.6297619047619048	34.4513888888888889	-55.0770069601914840
-60.5471023478835979	-53.5521908068783069	-48.4766764870931538		
11.7987914842914863	15.4605248917748918	16.4330808080808081	30.8800505050505050	-48.9268174230971850
-53.7711619633122609	-47.6607966160522979	-43.2123255917763493		
10.7212121212121212	14.0371572871572872	17.6426767676767677	26.9829545454545455	-45.5336431921253350
-49.7241963283629950	-44.1764051044354075	-40.1158917366303730		
-1.5000000000000000	-1.2500000000000000	-2.0000000000000000	0.0000000000000000	2.39285714285714286
2.96378968253968254	2.6319444444444444	2.3674242424242424		
9.7000000000000000	12.7500000000000000	17.0000000000000000	27.5000000000000000	-43.0932531682539682
-58.0917658730158730	-33.1458333333333333	-30.9494949494949495		
8.07142857142857143	10.2000000000000000	12.7500000000000000	18.2500000000000000	-32.1195436507936508
-28.3486394557823129	-45.3817640692640693	-21.9837481962481962		
7.28571428571428571	8.92857142857142857	10.7000000000000000	14.2500000000000000	-27.0531462585034014
-23.8538832199546485	-21.3411616161616162	-39.3130411255411255		

On "équilibre" A, et on obtient A' telle que $\|A'\|_1 = 262$.

Ensuite, on calcule m tel que $2^{-m} \|A'\|_1 < 1/2$, c'est-à-dire

$$m = 10.$$

On définit $B = 2^{-m} A'$ et on calcule $n_{pp}(-B)$ et $n_{pp}(B)$, pour résoudre le système : $n_{pp}(-B)H = n_{pp}(B)$.

Enfin, on calcule $(g_{pp}(B))^{2^m} = \overline{A'}$

On donne maintenant la matrice e^A calculée par la méthode de Ward

matrice exp de a				
-1.180278830479419937	-0.762516221871146212d-01	-1.156632230807061710	.777364287986565919	.110616766168066654
-1.82384950879146321	-1.1700000004090440533	-1.158873486916403680		
-1.127238002127043996	-0.552014352125129701d-01	-1.101366109851983547	.687219227374501700	0.897977200993918022d-01
-1.161909865541425041	-1.151498053383666678	-1.141977296431258890		
-1.110364566515029654	-0.897328368977305198d-01	-0.793642559280667323d-01	.615919361617512896	0.934152431610839876d-01
-1.128953570083753495	-1.121451785923494803	-1.114378336502003742		
0.973965800165880264d-01	-0.782107170147937202d-01	-1.112540323857294742	.925969269974705051	-1.102683587931697516
-1.282011547953453812	-1.260301697967743253	-1.241451264555006438		
-1.238569279602677855	-1.280752071527673472	-1.408681340199544516	-0.174274424446418050d-15	1.02265020574671821
.572921061992169991	.589419842922375706	.458678769972238679		
0.298722383117728453d-01	0.672125389987688575d-01	.102063485928753618	.551819155831333246	-1.443258364743714358
-1.395956662435666623	-1.357869078306084080	-1.326519098286826968		
0.248935322700029774d-01	0.547657729373799948d-01	0.796593066060229401d-01	.367879437564414459	-1.314027551400316049
-1.280204591683322690	-1.253031464485908200	-1.230704499272721148		
0.213373141314467398d-01	0.462308481681528461d-01	0.654344314753559537d-01	.275909579332709763	-1.244982748816743027
-1.218442470367522816	-1.197150286758926594	-1.179674733549133572		

Ensuite, on donne la matrice de différences avec e^A

mat. diff.				
0.246219602866026843d-14	0.187871907701003015d-14	0.386420496295558635d-14	0.191567681856463778d-13	0.270635835790400403d-14
0.449827349847942148d-14	0.418857114790893714d-14	0.391703271380994256d-14		
0.313123008424676108d-14	0.136227970093730222d-14	0.250159322510296045d-14	0.169242874922814757d-13	0.220402038633715769d-14
0.398368404236348894d-14	0.372439709281358056d-14	0.349321808458535887d-14		
0.271652275327105563d-14	0.221207058746786256d-14	0.195656479299449737d-14	0.151941176654291077d-13	0.228635198881027568d-14
0.318633465966333684d-14	0.299780545439526369d-14	0.282541730897006849d-14		
0.239795704994050229d-14	0.192636976249077607d-14	0.277612676770344624d-14	0.229348874961066151d-13	0.259650157277691029d-14
0.700822863283767639d-14	0.646276651986021911d-14	0.599810457378724404d-14		
0.592879694991110817d-14	0.694930224476308922d-14	0.101298093177493165d-13	0.174382844663666600d-15	0.254089204335012877d-13
0.141275879883551170d-13	0.125495317263024653d-13	0.113014523954457768d-13		
0.759493786221462908d-15	0.166952226782896007d-14	0.253853741413040401d-14	0.135716091143045503d-13	0.110425991267648627d-13
0.978568354820241737d-14	0.803613928553961259d-14	0.806537996111966748d-14		
0.630361919346650312d-15	0.135765151291350472d-14	0.197820817886273925d-14	0.902305574007611355d-14	0.781308611558229060d-14
0.691205990013821214d-14	0.62357887950537875d-14	0.568769749180464412d-14		
0.540393467821087548d-15	0.114678096662865214d-14	0.162630325872825665d-14	0.676124737794547848d-14	0.609917932131220519d-14
0.538905400339351193d-14	0.485909598148259736d-14	0.442999586666714684d-14		

Maintenant, on va donner la matrice e^A calculée par la méthode de la transformation du spectre.

matrice exp de a				
-0.100270830479422409	-0.762516221071165091d-01	-0.156632230807065583	.777364287986585089	.110616766168069391
-0.102384958079150810	-0.170000004090444714	-0.158873486916407589		
-0.127238002127047131	-0.552014352125143377d-01	-0.101366109851906052	.687219227374510629	0.897977200993940223d-01
-0.161909865541429019	-0.151498053383670397	-0.141977296431262378		
-0.110364566515032375	-0.897320368977327363d-01	-0.793642559280686923d-01	.615919361617528092	0.934152431610862911d-01
-0.128953570083756676	-0.121451785923497795	-0.114378336502006562		
0.973965800165904338d-01	-0.782107170147956577d-01	-0.112540323857297528	.925969269974727980	-0.102603587931700069
-0.202011547953460799	-0.260301697967749697	-0.241451264555012418		
-0.238569279602683783	-0.280752071527680423	-0.408601340199554647	-0.214846300659910074d-16	1.02265020574674362
.572921861992184128	.509419842922388265	.458678769977249990		
0.298722383117735993d-01	0.472125389987705220d-01	.102063485928756152	.551819155831346026	-0.443258364743725381
-0.395956662435676403	-0.357869878306092912	-0.326519098286835029		
0.248935322700036044d-01	0.547657729373813497d-01	0.796593066060249159d-01	.367879437564423492	-0.314027551408323851
-0.200204591683329601	-0.253031464485914436	-0.230704499272726835		
0.213373141314472777d-01	0.462308481601539989d-01	0.654344314753575784d-01	.275909579332716531	-0.244982748016749118
-0.218442470367528204	-0.197150286758931453	-0.179674733549130002		

Maintenant, on donne la matrice de différences entre e^A et $\overline{e^A}$ calculée par la méthode de transformation du spectre

mat. diff.				
0.909374572172216044d-17	0.914795583034644366d-17	0.791467585914410237d-17	0.136609473733173559d-16	0.310623922417097020d-16
0.889045781438113636d-17	0.729125960996501732d-17	0.777915058758349431d-17		
0.447233396150270579d-17	0.533291943591307493d-17	0.322550146314437569d-17	0.411996825544491685d-17	0.160326396256293968d-16
0.501443504774545801d-17	0.463496428737553146d-17	0.493311988480904517d-17		
0.443167638003449937d-17	0.440457132572236176d-17	0.342878937048540777d-17	0.216840434497100807d-17	0.171574993795831077d-16
0.563705129692462306d-17	0.504154010285759562d-17	0.569206140554809828d-17		
0.940545394631175097d-17	0.111130722679764204d-16	0.101101852584273208d-16	0.596311194867027439d-17	0.436391374425415535d-16
0.211419423634673365d-16	0.184856470408778506d-16	0.182680066063807497d-16		
0.786046575051990715d-18	0.146367293285543099d-17	0.487090977618476995d-18	0.215930502832395578d-16	0.346944695195361419d-17
0.954097911787243902d-17	0.975781955236953991d-17	0.954097911787243902d-17		
0.553620734325410702d-17	0.490732999343332040d-17	0.472983197746001309d-17	0.856519716263548503d-17	0.203830000427274834d-16
0.536680075380324695d-17	0.433680080994201774d-17	0.455364912443911862d-17		
0.335763860291604654d-17	0.279859685772820832d-17	0.238524477946810975d-17	0.943255890062388858d-17	0.108420217248550443d-16
0.921571046612678769d-18	0.162630325872825665d-18	0.487090977618476995d-18		
0.245978367882648818d-17	0.201255028267621761d-17	0.165340031304039426d-17	0.715573433840432926d-17	0.769783542464708148d-17
0.271050543121376109d-18	0.271050543121376109d-19	0.542101086242752217d-19		

Il est donc évident que l'avantage de la méthode de transformation du spectre sur la méthode de Ward, est dûe vraisemblablement au fait qu'on fait cinq multiplications au lieu de dix.

On étudie maintenant un deuxième exemple :

$$A = X J X^{-1} \text{ où } J = \begin{bmatrix} -5 & 1 & & & & & & \\ & -5 & 1 & & & & & \\ & & -5 & & & & & \\ & & & 2 & & & & \\ & & & & 2 & & & \\ & & & & -50 & 1 & & \\ & & & & & -50 & 1 & \\ & & & & & & -50 & \end{bmatrix} ; 8 \times 8$$

Donc A est donnée par :

nat. a				
34.0625000000000000	49.5119047619047619	60.5977182539682540	100.697916666666667	-160.345701648715042
-179.003940696649030	-159.038393608706109	-143.667557269119769		
34.7172619047619048	38.0937500000000000	54.8392857142857143	96.097222222222222	-142.374200037742504
-158.371518920068027	-141.114459325396825	-127.746144480519481		
31.2429202741702742	38.7658279220779221	43.4375000000000000	86.1300505050505051	-127.474109540701803
-141.519761550453515	-126.376613640463072	-114.599203843995511		
28.4015151515151515	35.2290764790764791	44.0214646464646465	80.0454545454545455	-119.703556612038755
-131.784065856982524	-117.944958695905666	-107.133975031702304		
-5.2500000000000000	-6.2500000000000000	-9.5000000000000000	0.0000000000000000	16.7767857142857143
12.9340277777777778	11.5034722222222222	10.3598484848484848		
26.5000000000000000	33.7500000000000000	45.0000000000000000	77.0000000000000000	-117.093253968253968
-153.522321428571429	-91.8125000000000000	-84.1351010101010101		
22.0714285714285714	27.0000000000000000	33.7500000000000000	51.2500000000000000	-87.2445436507936508
-77.0153061224489796	-118.965097402597403	-61.4569805194805195		
19.2857142857142857	22.9285714285714286	27.5000000000000000	39.0000000000000000	-71.3031462585034014
-62.8836451247165533	-56.2689393939393939	-100.928571428571429		

On "équilibre" A et l'on obtient A' telle que $\|A'\|_1 \approx 670$.

Ensuite, on applique la méthode de Ward pour calculer e^A et l'on

obtient :

matrice exp de a				
-4.60061332485465586	-6.12637705976658870	-9.19528415478650743	15.6137792566682032	11.4401055880879139
4.41673960601981433	3.77939582701421399	3.29301808033617842		
-3.94897106782307316	-5.24980572318071775	-7.07722094328259069	13.8031672959184161	9.57340448159229875
3.57647240628158128	3.04910917144092570	2.64801094463430776		
-3.45521857755721527	-4.59918716253393481	-6.89130549962523070	12.3710711959363433	8.21689117017671556
2.98547270364661321	2.53705416000032913	2.19695805011957409		
-3.07120995612631544	-4.08795635276439131	-6.13128020154663060	18.5985900671938905	3.08384670821750060
-1.14432969280465228	-1.19766738999807235	-1.21225741569055070		
-5.53673861394841680	-7.37726469168190053	-11.0642125507730915	0.504531457821760010d-14	24.1876125670932944
14.7123884784001262	13.0910482933720309	11.7937857655576394		
0.404276819945238957d-02	0.909622844876670386d-02	0.138127913481271571d-01	11.0835841483954543	-6.17604602323554415
-5.55803868152042555	-5.05247938077324265	-4.63123269991072771		
0.336897349954349216d-02	0.741174169899490022d-02	0.107807151985380737d-01	7.38905609893030276	-4.11987069220133210
-3.70755608389096431	-3.37027546346384071	-3.08925122243822565		
0.288769157103721067d-02	0.625666507058003421d-02	0.805558748451334656d-02	5.54179207419772703	-3.09118357285363144
-2.78178886042916083	-2.52870492337596924	-2.31783790358444542		

Maintenant, on étudie la matrice de différences entre la matrice e^A et l'approximation obtenue par la méthode de Ward.

mat. diff.

0.215417961246799905d-12	0.286890303180520334d-12	0.430575713972203289d-12	0.730126029080402361d-12	0.535150049274513151d-12
0.207300322740966436d-12	0.177481062589899183d-12	0.154617204456419799d-12		
0.185007825031057482d-12	0.245974247914393374d-12	0.369052878534947837d-12	0.645608566607336343d-12	0.448190096147271788d-12
0.168089066970855683d-12	0.143321986223465814d-12	0.124510644849973318d-12		
0.161902175693704400d-12	0.215529850911000409d-12	0.322917040329606664d-12	0.578564973707784702d-12	0.384844933698502700d-12
0.140449184147248221d-12	0.119374128637605992d-12	0.103416841062964338d-12		
0.144363687670789886d-12	0.192193483350422412d-12	0.288219101363118568d-12	0.870997718394050935d-12	0.146196423023159383d-12
0.521347288257034691d-13	0.548315733095439128d-13	0.556369186832661455d-13		
0.256707849421999867d-12	0.342048438184416881d-12	0.512999365209765301d-12	0.504444721647961170d-14	0.112261241969058290d-11
0.684598211453391059d-12	0.609259170091718327d-12	0.548980999548476234d-12		
0.110932686376696149d-14	0.132331957349539342d-14	0.194962589909059014d-14	0.520897561195887704d-12	0.284375821502091952d-12
0.257723530017184288d-12	0.234389764541820256d-12	0.214911421991814677d-12		
0.758632777230578911d-15	0.886445390290042934d-15	0.132642649034592219d-14	0.347394855937377400d-12	0.189551499496509734d-12
0.171849080105035412d-12	0.156290345248999429d-12	0.143302470584361075d-1		
0.581928151906175792d-15	0.671936837496733136d-15	0.101841651160405194d-14	0.260586691114284008d-12	0.142114618684185956d-12
0.126881260647696883d-12	0.117212663186538890d-12	0.107473491911536101d-12		

Maintenant, on étudie la matrice e^A calculée par la méthode par transformation du spectre.

matrice exp de a				
-4.60061332485487123 4.41673960602002180	-6.12637705976667557 3.77939582701439155	-9.19528415478693795 3.2931808033633317	15.6137792566689329	11.440185588084493
-3.94897106782325822 3.57647240628174985	-5.24980572318096383 3.04910917144106946	-7.87722094328295988 2.64801094463443266	13.8031672959190611	9.57340448159274758
-3.45521857755737721 2.98547270364675398	-4.59918716253415043 2.53705416000044879	-6.89130549962555373 2.19695805011967775	12.3710711959369215	8.21689117017710086
-3.07120995612645982 -1.14432969280470415	-4.08795635276458355 -1.19766738999812695	-6.13128820154692695 -1.21225741569060612	18.5985900671947611	3.08384670021764713
-5.53673861394867369 14.7123884784088117	-7.37726469168225085 13.0910482933726410	-11.0642125507736049 11.7937857655581891	-0.735282269382335619d-15	24.1876125678944183
0.404276819945133681d-02 -5.55803868152068343	0.909622844076544406d-02 -5.05247938077347719	0.138127913481253246d-01 -4.63123269991094273	11.0835841483959753	-6.17604602323582879
0.336897349954279290d-02 -3.70755608389113632	0.741174169899408508d-02 -3.37027546346399716	0.107807151985368683d-01 -3.08925122243836908	7.38905609893065018	-4.11987069220152192
0.288769157103666335d-02 -2.7817888042928981	0.625666507057940239d-02 -2.52870492337600655	0.88558749451239906d-02 -2.31783790358455297	5.54179207419798765	-3.09118357285377322
La matrice de différences est la suivante :				
mat. diff.				
0.433680868994201774d-16 0.163064006741819867d-15	0.164798730217796674d-16 0.155691431968918437d-15	0.503069808033274057d-16 0.126634813746306918d-15	0.463171168085807494d-15 0.166533453693773401d-15	
0.511743425413158093d-16 0.480952083714569767d-15	0.104083408558608426d-15 0.438017677684143791d-15	0.136175792064179357d-15 0.385975973404839579d-15	0.601949046163952062d-15 0.643582409587395432d-15	
0.446691295064027827d-16 0.313117587413813681d-15	0.902056207507939689d-16 0.287530416143155776d-15	0.116226472890446075d-15 0.248932818802671818d-15	0.317454396103755698d-15 0.451028103753969845d-15	
0.130104260698260532d-16 0.263461127913977577d-15	0.529090660172926164d-16 0.230501381870418243d-15	0.405722573273505986d-16 0.215756232324615382d-15	0.367761376907083104d-15 0.335668992601512173d-15	
0.177809156287622727d-15 0.872565908416333968d-15	0.264545330086463082d-15 0.813585310233122527d-15	0.404190569902596053d-15 0.676542155630954767d-15	0.736149631120324022d-15 0.130451205393455893d-14	
0.565741775800619739d-16 0.150920942409982217d-15	0.635223888463889996d-16 0.147451495458028603d-15	0.117129410012219159d-15 0.112757025938492461d-15	0.294902990916057206d-16 0.257606436182555854d-15	
0.59369808224747922d-16 0.160895602396848058d-15	0.713057745987087654d-16 0.153523027623947428d-15	0.121035925964955993d-15 0.124032728532341707d-15	0.303576608295941242d-16 0.272351585728358714d-15	
0.346127308401261019d-16 0.988792381306780044d-16	0.401129392831219012d-16 0.95843720477185920d-16	0.709220686736025674d-16 0.758941520739853104d-16	0.320923843055709312d-16 0.166099772824779279d-15	

Maintenant, on présente un troisième exemple.

Soit A une matrice 8 x 8 telle que $A = X J X^{-1}$ d'où

$$J = \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & & & & \\ & -1 & 1 & & & & & \\ & & -1 & 2 & & & & \\ & & & 2 & 10 & 1 & & \\ & & & & 10 & 1 & & \\ & & & & & 10 & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & 10 \end{bmatrix}$$

Donc A est la matrice suivante :

nat. a				
-14.270033333333333	-13.7103174603174603	-19.3189484126984127	-18.007797619047619	45.475230399674981
45.6019050641975309	41.3815999779541446	37.2818775553150553		
-11.6954365079365079	-13.9657738095238095	-16.008333333333333	-15.986111111111111	40.0367024124464601
40.2190659249811036	36.5195474086099636	32.9733019680936348		
-10.4578373015873016	-11.5947781385281385	-16.196338383838383	-14.324494949494949	36.3276130422707804
36.4323889225302916	33.1425505392124710	29.9832647816549332		
-9.459090909090909	-10.4880952380952381	-13.736111111111111	-10.977272727272727	31.1687377602556174
31.4313622334455660	20.6418309173990992	25.9378607503607504		
-2.2500000000000000	-2.2500000000000000	-3.5000000000000000	0.0000000000000000	7.66944285714285714
4.95783730158730159	4.4062500000000000	3.965909090909091		
-7.1000000000000000	-8.2500000000000000	-11.000000000000000	-13.000000000000000	25.9067460317460317
32.8307896825396825	21.4299242424242424	18.486111111111111		
-5.92857142857142857	-6.6000000000000000	-8.250000000000000	-8.750000000000000	19.6721250158730159
17.3180272108843537	25.4742965367965368	14.9894841269841270		
-4.71428571428571429	-5.07142857142857143	-6.1000000000000000	-6.0000000000000000	14.6968537414965986
12.9258786848072562	11.5411616161616162	20.4274891774891775		

On "équilibre" A pour obtenir A' telle que $\|A'\|_1 \approx 145$.

Ensuite, on calcule l'approximant de Padé $g_{88}(A'/2m)$ où m a été choisi de façon à ce que $\|A'/2m\| < 1/2$.

Alors, la matrice e^A calculée par la méthode de Ward est la suivante.

matrice exp de a				
-38789.1801789219279 143976.461898752981	-46439.2174595765603 144261.702472189475	-58187.0208109803164 137746.1028460.0534	-78486.4480936035448	145405.147590920860
-34179.4269958743824 126954.122432974044	-40997.4443830328283 127291.963570404601	-51354.9517849839352 121813.692694188685	-69239.5467535286419	128335.282300818648
-30603.2645747711761 113547.93113392682	-36703.2341218631242 113910.288340159860	-45965.7447885153447 109203.580585991028	-61950.9695737906087	114869.730251963264
-27707.3828666299360 102108.847693008450	-33226.4253517807454 103080.569492495758	-41604.7081410941554 98967.4282703536199	-56040.7688876226060	103967.899244667321
-5.26588249331915267 13.5470980917057826	-6.74526707688031818 12.0515125341046843	-10.0259307550276041 10.8553650647913642	0.550507274322108462d-12	22.8615461439793081
-28948.8486026526832 121473.151162578666	-35241.8486344451499 111054.599320683228	-45153.5007264993478 91622.4217181118393	-63315.0055759208875	112692.730578610165
-20452.962869.427864 65541.1868940509457	-24228.7077069020908 80655.2245417536161	-29735.1402150331816 75077.4354921883143	-38538.9260848128079	74345.3326419196642
-9439.75624944237270 29224.7805262970459	-11012.8912950651232 26132.3220203496600	-13215.3959781899130 45665.1801225579493	-16514.3075540308314	33167.0522604120953

La matrice de différences entre la matrice e^A et celle calculée par la méthode de Ward est :

mat. diff.

0.163424029224823043d-10 0.192343918570259120d-10 0.249968934440403245d-10 0.337649908033199608d-10 0.638351593806874007d-10
0.704289959685411304d-10 0.625277607468888164d-10 0.45270.831226335838d-10

0.140047973218315747d-10 0.164632751875615213d-10 0.214441797652390236d-10 0.289901436190120876d-10 0.547970557818189263d-10
0.606519279244821519d-10 0.536317656951723620d-10 0.385966814064886421d-10

0.125091048630565638d-10 0.147437617670220789d-10 0.191633375834499020d-10 0.259134935731708538d-10 0.489563944938709028d-10
0.541859890290652402d-10 0.480753215015283786d-10 0.345323769579408690d-10

0.113082076396219945d-10 0.133084654407866765d-10 0.172875047610432375d-10 0.233910668612224781d-10 0.442952341472846456d-10
0.488284968014340048d-10 0.433999503002269194d-10 0.310507175527163781d-10

0.253207177447478671d-12 0.307905610730241364d-12 0.394489996224933748d-12 0.550506406968370474d-12 0.986096621025112086d-12
0.105341256551039208d-11 0.998175500580338593d-12 0.775698949517789060d-12

0.129531940729066264d-10 0.152624579641269520d-10 0.198738803192100022d-10 0.268585154117317870d-10 0.505480102219735272d-11
0.562891955269151367d-10 0.489421636391557000d-10 0.364508423444931395d-10

0.76525452e-113627900d-11 0.895283847057726234d-11 0.115925047339260345d-10 0.155822021952189971d-10 0.298143731924938038d-11
0.322017967846477404d-10 0.296580537996265818d-10 0.212168668079639166d-10

0.380673270683473675d-11 0.450484094471903518d-11 0.509920106544023179d-11 0.80646005087713711d-11 0.151061385622597300d-11
0.168576264059083769d-10 0.150492951433989219d-10 0.905522774499258958d-11

Si maintenant on utilise la méthode de transformation du spectre,

on a :

matrice exp de a				
-38709.1001709219444 143976.461898753052	-46439.2174595765796 144261.702472189538	-50187.0200109003415 137776.102848060500	-78486.4480936035790	145405.147593920924
-34179.4269958743165 126954.122432974104	-40997.4443830328447 127291.963570404655	-51354.9517849839567 121813.692694188724	-69239.5467535206712	128335.282300818703
-30603.2645747711888 113547.931133392737	-36703.2341218631391 113910.208340159909	-45965.7447885153641 109203.580585991064	-61950.9695737906351	114869.730251963313
-27707.3828666299474 102708.847693008499	-33226.4253517007507 103080.569492495801	-41604.7081410941727 98967.4282703536511	-56048.7688876226297	103967.899244667366
-5.26580249331939250 13.5470980917067904	-6.74526707688061026 12.0515125341056329	-10.0259307550280589 10.8553650647920912	0.247974292975940751d-13	22.0615461439802455
-28948.8486026526963 121473.151162570723	-35241.8486344451653 111054.599320683278	-45153.5007264993678 91622.4217181118764	-63315.0055759209148	112692.730578610216
-20452.9628697427941 65541.1868940509782	-24228.7077069020998 80655.2245417536462	-29735.1402158031933 75077.4354921883359	-30530.9260840120238	74345.3326419196943
-9439.75624944237642 29224.7805262970622	-11012.8912950651276 26132.3220203496740	-13215.3959781899180 45665.1001225579588	-16514.3075540300394	33167.0522604121099

La matrice de différences entre l'exponentielle de A exacte et celle approchée par la méthode de transformation du spectre est :

mat. diff.				
0.135003119794419035d-12	0.5604341886000000149d-13	0.923705556488130242d-13	0.412114786740858108d-12	0.142108547152020037d-12
0.198951966012028052d-12	0.5604341886000000149d-12	0.426325641456060112d-12		
0.852651202912120223d-13	0.000000000000000000	0.710542735760100186d-14	0.204217094304040074d-12	0.142108547152020037d-13
0.170530256582424d-5d-12	0.298427949019242078d-12	0.113686037721616030d-12		
0.177635683940025046d-12	0.127897692436810033d-12	0.198951966012028052d-12	0.511590769747272134d-12	0.412114786740858108d-12
0.426325641456060112d-12	0.710542735760100186d-12	0.639488462184090167d-12		
0.497379915032070130d-13	0.710542735760100186d-14	0.204217094304040074d-13	0.240689957516035065d-12	0.204217094304040074d-13
0.426325641456060112d-13	0.298427949019242078d-12	0.156319401867222041d-12		
0.132975228051002148d-13	0.150258022713364111d-13	0.196301308541535491d-13	0.247965619358560867d-13	0.408667490767650679d-13
0.455260829035353254d-13	0.495593149851814019d-13	0.407405255045203489d-13		
0.181108397610825547d-12	0.127897692436810033d-12	0.156319401867222041d-12	0.461852778244065121d-12	0.326849650449646086d-12
0.397903932025656104d-12	0.625277607468880164d-12	0.602121026329696178d-12		
0.112239551400416531d-12	0.923705556488130242d-13	0.135003119794419035d-12	0.341060513164848089d-12	0.255795304873636067d-12
0.355271367800050093d-12	0.426325641456060112d-12	0.397903932025656104d-12		
0.923705556488130242d-13	0.135003119794419035d-12	0.175559327100624796d-12	0.135003119794419035d-12	0.454747350884464119d-12
0.543565192056476643d-12	0.259348098557436543d-12			

Soit maintenant la matrice A, de taille 16 x 16 donnée par :

mat. a	73.0172550896815633	71.0202339510979217	24.1150789945348769	23.0950770789667848
22.57564615144247517	14.074555107686431	320.346798226283520	-295.93752135649464	-276.856589290743575
-259.884123560001309	-245.324244788719636	-233.073636116018469	-221.519252649388665	-211.202766744020086
-201.665006844928822				
42.754894190765437	57.2155450105650105	87.7281459063812005	29.8289926739926740	28.5702441386811135
30.2723455280451575	17.4807158539521481	393.37844312501949	-360.378739893749848	-337.191419858641890
-316.545059110927798	-298.83055752372696	-283.941792856192218	-269.885195607756720	-257.337557067156863
-245.729660332475758				
49.8376832393183312	105.089154288583793	82.1714309304673082	34.7794970503230123	33.3143993337522814
35.2935875907368135	20.450724213474834	455.82632285842812	-419.864677112259132	-392.773713160403958
-368.65691397036310	-347.96350200637723	-330.579904338503697	-314.174271903119403	-299.536480407592310
-285.996047981889171				
56.0348797734772967	118.08790294329940	114.789315143820633	33.1122814124729759	37.4668375252771538
39.6870462326631057	28.0635972546297871	509.872549601379013	-477.092138449949433	-446.21503247212482
-418.738532677042150	-395.153278533750397	-375.335689036875394	-356.651158761342643	-339.985306949129417
-324.574206735351104				
61.5052921522921523	129.553810411810412	125.912665695415695	42.9377070707070707	36.1331494949494949
43.564946446464645	25.3805972222222222	557.130166566666667	-522.693472392800987	-488.852418204687812
-458.733103213029462	-432.873505514228420	-411.150599648696414	-390.66988802250954	-372.405702765564844
-355.51456845126294				
66.3714034396141258	139.738728486855422	135.795870818017361	46.3410205996774108	44.3949407890167811
42.513983934179179	27.469242306048097	598.818848036822385	-562.906789021247227	-526.454207292856300
-494.704943109105324	-466.138738921184113	-442.736757745229631	-420.671902649108130	-403.998328905497603
-382.801427552956570				
70.7293210874046535	148.855871593109781	144.837987996307488	49.3891845960730492	47.3163395055442606
50.1022706075397690	27.2076438300512633	535.980147573071251	-599.77111672635633	-560.931545986208095
-526.352256441738728	-496.648996948721088	-471.7070318995953205	-448.190714530011897	-427.225562097912280
-407.83210548482238				
74.6555707324686999	157.064565315519347	152.597165099252435	52.1355748913184302	49.9486777500210264
52.8840954109253149	30.9864118552212508	639.052423314083278	-615.501449784572468	-575.491088384619417
-539.867715924186977	-509.295409353503495	-483.675775036287121	-459.498546256405377	-437.959246581781093
-418.027603859488226				
15.575000000000000000	39.800000000000000000	39.433333333333333333	8.120000000000000000	6.650000000000000000
6.533333333333333333	-5.600000000000000000	376.6000000000000000	-267.612331345128463	-268.738576945929387
-234.865648999198222	-222.44441203977757	-211.289933990368077	-201.214857397504456	-192.067542845134441
-183.723953399930113				
18.333333333333333333	41.250000000000000000	40.7142857142857143	12.5000000000000000	12.0000000000000000
13.125000000000000000	6.500000000000000000	217.5000000000000000	-187.830942954104719	-177.203693320405085
-165.966612150933248	-156.87889260254709	-145.752961447736900	-141.441026530229317	-134.824582883912874
-128.307452032196279				

22.40000000000000000000	44.44444444444444444444	44.00000000000000000000	18.2857142857142857	18.66666666666666666667
23.50000000000000000000	47.20000000000000000000	170.666666666666666667	-180.1483333363521699	-168.715525619727300
-156.58324846878189	-140.802873700087322	-141.8825236330390524	-134.771904806579729	-123.350579696545198
-122.521350520050852				
23.18181818181818181818	44.20000000000000000000	43.44444444444444444444	19.12500000000000000000	19.4285714285714286
21.25000000000000000000	18.20000000000000000000	140.250000000000000000	-163.639916703666704	-153.13981097083724
-143.887117035011772	-132.736812177831915	-128.478226285410495	-121.969893293840662	-115.099282974490831
-110.77564702432299				
18.25000000000000000000	38.45454545454545454545	36.90000000000000000000	13.00000000000000000000	12.37500000000000000000
12.8571428571428571	9.40000000000000000000	109.800000000000000000	-123.341349225640669	-115.34619467653286
-108.352195613017014	-102.17757331936949	-96.1836360118209963	-91.7610694517041266	-87.323719764960406
-83.3020855877195896				
18.4153846153846154	37.366666666666666667	35.381818181818181818	12.54000000000000000000	11.822222222222222222
12.11250000000000000000	7.87142857142857143	96.500000000000000000	-113.524733738483738	-105.111380838660250
-99.6330107670107570	-93.9188792969222833	-85.8383296895531797	-83.6894637202200227	-80.1915080067701551
-78.4795242418848557				
17.142857142857143	35.3861538461538462	33.335000000000000000	10.9109090909090909	10.000000000000000000
13.002222222222222222	5.752500000000000000	85.7171428571428571	-100.929514059129868	-94.3031438515732633
-88.5171783639311920	-83.4173034090856588	-78.8856205232215571	-74.8303081285759304	-71.1776686853213741
-67.8723192433065249				
17.22000000000000000000	34.950000000000000000	32.7923076923076923	11.025000000000000000	10.1151518151518152
10.08000000000000000000	6.066666666666666667	79.537500000000000000	-97.2613696009872480	-90.84487253595671297
-85.2457940112003579	-80.3134490412837336	-75.9328316355986633	-72.0144566671718374	-68.4875362754197389
-64.9932647136089558				

La norme de A' est 5207.

11. 9740381761990335	13. 1800783025923253	14. 65929996109252533	16. 507236433061600	18. 8937133192622526
21. 1150748913262259	26. 3854787548547716	34. 3804704992944479	-78. 0585213567235045	-72. 8879903366587024
-66. 691651810825881	-59. 9742775299501099	-60. 7594565982106509	-57. 6155953006206326	-54. 9687916620393501
56. 359799899078339	16. 3134331925965471	18. 1432437624092964	20. 4295670920753108	23. 3804206036448281
14. 8213404540193315	32. 275518893282356	42. 149893551325148	-96. 5817708261995497	-90. 1952331148362381
-82. 5286721160527791	-74. 2015768098930280	-75. 1742481579965573	-71. 2821726081377668	-68. 0385655869381410
-64. 7754986927731543	19. 0283559364264558	21. 161675373456684	23. 8269380720411829	27. 25664758445645772
17. 2886964195743954	37. 5352970763223748	49. 1316768781044354	-112. 620942747171938	-105. 15310291972715
31. 90355082095344	-85. 5192853709456436	-87. 654864837980678	-83. 1141904141330822	-79. 29821590183567212
-95. 2455022422251	21. 4037999339945516	23. 8023895218466158	26. 8013034273431102	30. 653493616086596
-75. 539679439303626	42. 321561812942831	55. 232565647277273	-126. 647512633476683	-115. 251470393840352
19. 467677222159439	-97. 2915275954033270	-98. 568338752638708	-93. 4598547513484566	-89. 1598713286053967
35. 877620463111805	23. 4998817614048438	26. 13236442350216090	29. 4207061915148187	33. 6732795788762056
-108. 243613147505533	46. 4544583110919307	60. 6039934768011996	-139. 018461541796651	-129. 514450152670943
84. 9298798297317735	-106. 791956018854582	-108. 19352036703359	-132. 583816257193380	-97. 8759651572946700
21. 528892198415930	25. 36329568505023226	28. 2035112771851717	31. 7511578969542194	36. 3281658396539386
37. 3831202837138656	50. 1265165397039427	65. 3855022148908877	-150. 011876512324690	-140. 080993342861260
-118. 826184091117536	-115. 233890919113211	-116. 746259185607275	-110. 690765038287108	-105. 511760095208018
-93. 2196922750715130	27. 30852467648589	30. 0568562570937596	33. 8363429726742542	38. 7121032231619325
23. 066728793647639	45. 2824031274707329	69. 6533113854717663	-159. 893765983916070	-149. 30768478138499
42. 5075911961494978	-122. 82555229635164	-124. 434966276908696	-117. 978573524969109	-112. 556037211073956
-128. 23554743585036	28. 5317584566370703	31. 7251117831874041	35. 71316159665524617	40. 8575933502191474
-100. 58520161117528	56. 3662835198681834	73. 495813526690889	-168. 684053305114843	-157. 518492421185465
24. 506223026977352	-129. 571063056180514	-131. 271735708964800	-124. 458217007752464	-118. 749181610963320
-174. 217031638672455	28. 9309843058174175424-01	-105114900775435711	-11919726060732775	-134039393880457199
-107. 206425046763934	-1838762324577427	-63688833507954057	-415296980321146839	-430595048447076318
25. 9272843159863421	-148556039204616287	-361088433134367756	-34274243672244971	-32623080511078106
47. 789359383503135	-38155856820758965	-788313083807271873	-913501722486365474	1. 08342448251639079
-16. 217031638672455	1. 3381298724231236	2. 759095878354818	-4. 8157710007235077	-4. 1397395685398972
-113. 092829788353118	-3. 97802170808608418	-3. 78473924139203234	-3. 59334450643882056	-3. 420939351703150157
613122161598095521	689773952003614005	14. 7781121937306118	16. 883605363999444	19. 6881817386728395
1. 3378916737355599	1. 3381298724231236	39. 4082991942746193	-84. 289421059476397	-78. 8629325938184437
-4. 23726005139511156	-3. 97	-56. 40956701842480602	-62. 7274133278639230	-59. 6896565649941272
5. 2638578735878355	13. 1360397312423797	37. 9393475176619556	42. 6764986133740643	48. 7627975135730498
11. 8224799274825631	29. 155193020814982	85. 3363519235002783	-200. 385579646710350	-187. 32202121433063
23. 6943072764218132	-59. 952828079500172	-156. 81401739337157	-148. 768009448312424	-141. 516850165594302
-53. 581509546645972	34. 145512769225252	2. 967992735370345002	3. 29248503704500771	3. 69446247832519430
-56. 9354967697421937	67. 949454701414737	6. 64537280392921377	-14. 6766681181203144	-13. 7126135185588795
1. 8224799274825631	-145. 71393920354019	-12. 1266054907861594	-10. 8737456186369785	-10. 3508420483039215
31. 0412748402169325	2. 69792735370345002	4. 67351982380099395	3. 45731609160429499	3. 83347069049077927
56. 87756457912409462	4. 64537280392921377	-12. 1266054907861594	-14. 9883178933291366	-13. 999095048064309
-175. 88974125408848	-12. 1266054907861594	2. 89502143378749989	-9. 26801703362166410	-10. 5647375871884706
-134. 946987100091178	2. 89502143378749989	4. 67351982380099395	1. 8154940872555808	1. 98852510633407827
2. 47397269873022939	4. 67351982380099395	-12. 3729817856943993	5. 77004286789984506	-7. 6385464780092610
4. 21100299069953943	-12. 3729817856943993	1. 66833415350829122	-11. 6959434274070709	-5. 66444886152486725
-12. 8498422012603255	1. 66833415350829122	2. 86000142904591532	3. 14729610620344124	3. 45731609160429499
-9. 85828179240843052	2. 86000142904591532	-5. 3900357168043296	5. 77004286789984506	-14. 9883178933291366
2. 66308772825884312	-5. 3900357168043296	1. 54000026932847569	-11. 6959434274070709	-9. 26801703362166410
4. 30114828414663417	1. 54000026932847569	2. 25185414110835630	1. 66833415350829122	1. 8154940872555808
-13. 1348819114251323	2. 25185414110835630	-6. 3900357168043296	2. 86000142904591532	5. 77004286789984506
-10. 3510393370314539	-6. 3900357168043296	2. 92479821120889853	2. 86000142904591532	-7. 6385464780092610
1. 42999193750581735	2. 92479821120889853	2. 91373324898900336	2. 86000142904591532	-5. 66444886152486725
2. 1997589695085353	2. 91373324898900336	-8. 5850050452827591	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-6. 68972701154576366	-8. 5850050452827591	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
-5. 113839305031789428	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
1. 85979732870800560	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-8. 5850050452827591	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423	2. 81137450317754423	-7. 6385464780092610	2. 86000142904591532	-2. 35791509694745604
-7. 6385464780092610	-7. 6385464780092610	5. 23916675665738341	2. 86000142904591532	-9. 26801703362166410
5. 23916675665738341	5. 23916675665738341	2. 81137450317754423	2. 86000142904591532	-4. 5647375871884706
2. 81137450317754423				

Matrice de différences entre e^A calculée par la méthode de Ward
et la valeur exacte.

0.495995927157994733d-11	0.75233724627837403d-11	0.36222584232581871d-11	0.949206339529684501d-11	0.108593297418133712d-10
0.17225099354120856d-10	0.151796663798902430d-10	0.18796663798902430d-10	0.445466966623222435d-10	0.418650368280755120d-10
0.3893030337953535d-10	0.340305625791905542d-10	0.347703124718284078263d-10	0.32778273151290491d-10	0.31235538733626386d-10
0.29845116524335263d-10	0.29845116524335263d-10	0.29845116524335263d-10	0.29845116524335263d-10	0.29845116524335263d-10
0.5459321592895281678d-11	0.931012211768944553d-11	0.103481320734566395d-10	0.11745928527577744d-10	0.134485739539322392d-10
0.157771742599096569d-10	0.232426994317691538d-10	0.232426994317691538d-10	0.55110069258241814d-10	0.513245557155475930d-10
0.471291615843672045d-10	0.429252654799534791d-10	0.429252654799534791d-10	0.429252654799534791d-10	0.38533733557119396d-10
0.36944197012503435d-10	0.103623179995239730d-10	0.120777680302140d-10	0.1370195236289476d-10	0.15697546549399846d-10
0.2992597789026583d-10	0.270991562523192897d-10	0.270991562523192897d-10	0.642771252890028677d-10	0.598451565993496016d-10
0.183589150825168320d-10	0.507564958917322747d-10	0.507564958917322747d-10	0.477899913672719563d-10	0.45022610639556247d-10
0.423086340951276512d-10	0.122115234590935984d-10	0.135718380378033792d-10	0.15404046247892770d-10	0.1763330376095524375d-10
0.11135563423341144d-10	0.246135750670036814d-10	0.30445558571848875d-10	0.72243266923233500d-10	0.672523879963607039d-10
0.206142998243513875d-10	0.551335643805828113d-10	0.562576710780252165d-10	0.53147292128015593d-10	0.50597750497088673d-10
0.51794580637288255d-10	0.134015715191893037d-10	0.1489371822331794180d-10	0.169023394103019418d-10	0.173532689873876507d-10
0.484230333528409776d-10	0.27059183349348830d-10	0.3392746909090537d-10	0.79264283562642825d-10	0.73821226901320565d-10
0.12223307853489339d-10	0.268400148628513575d-10	0.51736131695523330d-10	0.58308022310107590d-10	0.555136908664266571d-10
0.226400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.146772742820280181d-10	0.182445759888683057d-10	0.2088505757722507870d-10
0.278400148628513575d-10	0.244411085901920573d-10	0.360324685754509571d-10	0.855494564078185249d-10	0.79674377803468228d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.53126783509772843d-10	0.14530800127308335d-10	0.171231594567627069d-10	0.194275698466289775d-10	0.223779951667407144d-10
0.119443026415973557d-10	0.2678110305333755d-10	0.38322933631930295d-10	0.91112228877028717d-10	0.86855933510620365d-10
0.278400148628513575d-10	0.53126783509772843d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	0.599134630796527290d-10
0.57805098079427578d-10	0.7319202316530863573d-10	0.666269261984098193d-10	0.629298280152568168d-10	

La matrice exponentielle de A calculée par la méthode de transformation du spectre est :

11. 9740381732058555	13. 1800783025908436	14. 6592994109336077	16. 5072336413315626	18. 8937133192731197
22. 111507481453474	26. 0854787548699476	34. 0804704993031306	-78. 058213567680297	-72. 8879833367091912
-55. 6911518137305658	-59. 9742975299940536	-60. 7594564982452981	-57. 6155953006533194	-54. 9637716620704962
-32. 359798898376583	16. 3134301926058453	18. 14324376224196280	20. 4295670920870491	23. 3804206000582579
14. 821340450280196	32. 2756518893469995	42. 1498933551536002	-96. 581770826254563	-90. 1852331148874199
22. 359875912671564	-74. 201576810299908	-75. 1742181580337894	-71. 2821726081781741	-68. 0385635869766442
-82. 5286721151098395	19. 0283559364373179	21. 1616753734777258	23. 8269380720548814	27. 2664758445803568
-64. 778499698100160	-37. 63527076342570	49. 1316768781313607	-112. 670942747236105	-105. 163102982032432
17. 2889664195842922	-86. 519983370994020	-87. 6548648838480407	-83. 1141904141802250	-79. 2982189018816487
31. 9035506452279320	21. 4037999340067386	23. 8023895218601562	26. 8013034273584941	30. 6553493616262657
-96. 245503324771565	42. 3215618129738619	55. 232556547579437	-176. 647152635048725	-118. 25140938470567
-75. 529679439343652	-97. 291527584592914	-98. 5683387526948120	-93. 459847514013798	-89. 159871328588301
35. 8773605643317801	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
-108. 243613147567125	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-84. 929878849870455	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
21. 3528892198538055	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
39. 3921202837364719	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-118. 828184091185059	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
-93. 215692225124534	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
23. 047287936606519	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
42. 505911961732970	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
-128. 235541435458186	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
-100. 585201611233558	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
24. 562622027117357	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
45. 2824031274947495	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
-136. 874668900465834	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-107. 20642504680204	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
25. 9372843160011832	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
47. 789359383777730	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-142. 217021638754555	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
-113. 09282078417441	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
0. 788253513716161594-01	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
1. 5839767324899191	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
-40. 556039025568787	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
-311205762323859754	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-61312161598502575	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
1. 3378891637353254	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
-4. 23726005139783495	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-3. 26385787358994052	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
11. 822479927542518	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
23. 6094307276556531	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-66. 681609546842843	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
-56. 935494769743391	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
31. 0412748402345130	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
56. 877545792173246	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
-175. 889741224187886	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
-134. 946987100151124	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
2. 47307268973156429	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
6. 2110299070199197	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
-12. 8698422012677553	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-9. 85828179741409575	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
2. 663877286033720	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
6. 30114825414912577	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-13. 1348819114326751	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
-13. 0510395370372311	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
1. 4299919370766475	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
2. 19975889595216349	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
-6. 6872701154964327	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
-5. 1133905032055033	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
1. 8807937287091153	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563
2. 8113746317929353	23. 4998417614182292	26. 1323422350364832	29. 4207061913317156	33. 670279578955481
-8. 58500504528728589	46. 454583111189269	60. 609849748343754	-139. 018461541875747	-129. 814660152744582
-5. 20916676666061521	-106. 791956018915043	-108. 193520326764977	-132. 583816257251504	-97. 8759851573500563

On peut conclure que la méthode par transformation du spectre est supérieure à la méthode de Ward.

Cela est dû au nombre plus petit de multiplications effectuées dans la dernière étape de l'algorithme.

En plus, on trouve que si la norme de A augmente, la table donnée dans le premier paragraphe de ce chapitre perd toute sa signification.

CHAPITRE 4

MÉTHODE POUR CALCULER L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE QUI UTILISE UN ALGORITHME DE BLOC DIAGONALIZATION

1. INTRODUCTION

On a remarqué dans le chapitre 3 que la méthode de Ward et la méthode par transformation du spectre sont très sensibles au nombre de produits matriciels effectués dans la dernière étape de l'algorithme. Il est donc souhaitable de réduire encore le nombre de produits matriciels et la taille de matrices considérées.

Autrement dit, on va essayer d'utiliser une méthode de bloc diagonalization pour transformer un problème de taille $N \times N$ en r problèmes de taille $k_i \times k_i$ tels que $\sum_{i=1}^r k_i = N$

Donc, on va trouver une matrice J telle que :

$$1) \quad A = X J X^{-1} \text{ où } J = \text{diag}(J_{k_i}, i = 1, \dots, r)$$

et

$$2) \quad e^A = X \text{diag}(e^{J_{k_i}}, i = 1, \dots, r) X^{-1}$$

Cette "bloc diagonalization" doit être faite de façon à ce que le calcul de $e^{J_{k_i}}$ soit aisé et le produit 2) n'introduise pas une erreur supplémentaire.

Pour que le calcul de $e^{J_{k_i}}$, par la méthode de Ward soit plus aisé il faut que la norme de J_k soit petite. Par la méthode par transformation du spectre on doit avoir $\lambda_{\max} - \lambda_{\min}$ aussi petit que possible.

On va donc utiliser une méthode pour bloc diagonalizer une matrice due à C.A. Bavely et G.W. Stewart [17]

2. METHODE POUR BLOC DIAGONALIZER UNE MATRICE A

Il est question d'une méthode pour réduire une matrice A, de taille $N \times N$, à coefficients réels, à une forme diagonale par bloc.

Donc, il s'agit là de calculer deux matrices X et J telles que :

$$3) \quad X^{-1} A X = J = \text{diag}(J_{k_i} ; i = 1, \dots, r)$$

où J_{k_i} est une matrice de taille $k_i \times k_i$ à coefficients réels.

Le mieux qu'on peut faire, du point de vue théorique, c'est arriver à la détermination de la forme de Jordan de A et de la matrice de transformations X avec précision.

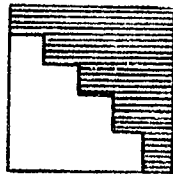
Du point de vue pratique, on trouve de grandes difficultés pour calculer la forme de Jordan de A, car une perturbation numérique de A peut souder deux blocs originalement séparés et vice-versa. En plus, le calcul de X et X^{-1} peut être très mal conditionné.

La méthode de Bavelly et Stewart pour bloc diagonaliser une matrice prend le parti de laisser à l'utilisateur un choix relatif du conditionnement de X, la taille de blocs étant alors une conséquence non contrôlable de façon directe. Il est évident que plus grand sera le conditionnement de X accepté, plus petits seront les blocs de J.

On va faire maintenant une description résumée de l'algorithme pour comprendre mieux sa démarche.

Une première partie est destinée à obtenir une forme bloc triangulaire :

$$4) \quad A' = X'^{-1} A X' =$$



où les blocs de A' sont de taille 1×1 pour les valeurs propres réelles de A et 2×2 pour les valeurs propres complexes conjuguées, de façon à écarter tout calcul en nombres complexes.

L'algorithme utilisé pour calculer la forme bloc triangulaire, c'est un algorithme qui utilise des transformations orthogonales qu'on accumule dans X'.

Avec des transformations orthogonales on peut aussi changer de place plusieurs lignes et colonnes pour réordonner à notre guise les blocs qui se trouvent sur la diagonale.

Une fois la bloc triangulation finie, on va procéder à la bloc diagonalization.

On peut écrire :

$$5) \quad A' = \begin{matrix} & \begin{matrix} \overbrace{\phantom{A_{11} \quad A_{12}}}^{k_1} & \overbrace{\phantom{A_{12} \quad A_{22}}}^{N-k_1} \end{matrix} \\ \begin{matrix} \overbrace{\phantom{A_{11} \quad A_{12}}}^{k_1} \left\{ \begin{matrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{matrix} \right\} & \end{matrix} \end{matrix} \begin{matrix} \\ N-k_1 \end{matrix}$$

où A_{11} est le premier bloc 1×1 ou 2×2 de A' .

Il s'agit alors de trouver une matrice X telle que :

$$6) \quad X^{-1} A' X = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$$

Bavely et Stewart se sont bornés à un type de transformation dans laquelle ils cherchent X . Ce sont des matrices du type :

$$7) \quad X = \begin{matrix} & \begin{matrix} \overbrace{}^{k_i} & \overbrace{}^{N-k_i} \end{matrix} \\ \begin{matrix} \overbrace{}^{k_i} \left\{ \begin{matrix} I & P \\ 0 & I \end{matrix} \right\} & \end{matrix} \end{matrix} \begin{matrix} k_i \\ N-k_i \end{matrix}$$

et

$$8) \quad X^{-1} = \begin{bmatrix} I & -P \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

Alors, le conditionnement de X peut être contrôlé en posant des restrictions sur P . Dans notre algorithme, on considère la restriction

$|p_{ij}| < R$, où R est un nombre fixé par l'utilisateur.

Donc, on trouve que si P existe alors

$$9) \quad X^{-1} A' X = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{11} P - P A_{22} + A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$$

alors l'existence de P dépend de l'existence d'une solution de l'équation

$$10) \quad A_{11} P - P A_{22} = - A_{12}$$

telle que $|p_{ij}| < R$

La résolution numérique de ce système par la méthode de Bavely et Stewart est possible si les valeurs propres de A_{11} et A_{22} sont différentes.

S'il n'existe pas X qui remplit toutes les contraintes, alors on élargit le bloc A_{11} de la façon suivante :

- i) on calcule la moyenne des valeurs propres de A_{11} qui n'ont pas une partie imaginaire négative.
- ii) on trouve la valeur propre de partie imaginaire non négative plus proche de la moyenne calculée en i).
- iii) on échange les blocs diagonaux, au moyen de transformations orthogonales, pour mettre le bloc qui correspond à la valeur propre calculée en ii) à la suite de A_{11} pour créer un nouveau A_{11} .

Donc on sépare un bloc A_{11} plus grand et qui peut correspondre à plusieurs valeurs propres différentes de A . C'est-à-dire que notre forme bloc diagonale peut être très différente de la forme de Jordan.

Les transformations effectuées à chaque pas de l'algorithme sont accumulées dans X et ses inverses en Y .

Le choix d'un paramètre R grand entraîne un calcul de P moins précis, donc un calcul de X et X^{-1} taché d'erreurs d'arrondi.

Dans un paragraphe postérieur, on fera une étude pratique sur le choix de R .

3. ALGORITHME POUR CALCULER L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE QUI UTILISE LE PROGRAMME DE STEWART ET BAVELY.

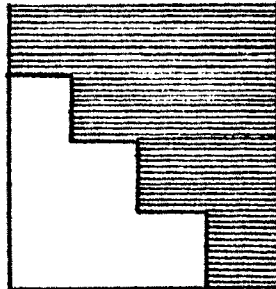
On a présenté dans le paragraphe précédent un algorithme dû à Bavely et Stewart pour calculer une décomposition à la forme bloc diagonale d'une matrice.

Maintenant, on va décrire l'usage qu'on va faire de cet algorithme. C'est-à-dire, on va décrire un algorithme pour le calcul de l'exponentielle d'une matrice qui utilise l'algorithme de Stewart et Bavely et la méthode de Padé.

Etant donnée une matrice A de taille $N \times N$, on obtient A' , forme bloc triangulaire de A. Les valeurs propres de A sont ordonnées par module décroissant de la partie réelle.

11)

$$A \rightarrow A' =$$



En fonction des valeurs propres de A, on peut choisir R tel que la réduction en bloc diagonale regroupe dans un bloc les valeurs propres désirées.

On donnera des exemples pratiques du choix de R dans le paragraphe suivant.

Donc, une fois appliquée la méthode de bloc diagonalization, on trouve :

12)

$$A'' = \begin{bmatrix} J_{k_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & J_{k_r} \end{bmatrix}$$

où J_{k_i} est un bloc de taille $k_i \times k_i$ qui peut être très différent du bloc de Jordan.

On obtient aussi dans cette étape une approximation de X et X^{-1} telle que :

$$A = X A'' X^{-1}$$

Dans l'étape qui suit on peut procéder de la façon suivante :

- i) Si $k_i = 1$ alors $e^{\overline{J_{k_i}} t} = e^{\overline{\lambda_{k_i}} t}$ machine.
- ii) Si $k_i > 1$ alors on utilise la méthode par transformation du spectre, c'est-à-dire, on calcule :

$$13) \quad e^{\overline{J_{k_i}} t} = g_{pp} \left(\frac{\overline{J_{k_i}}}{2^{m_i}} \right)^{2^{m_i}} \quad \text{avec} \quad \rho \left(\frac{\overline{J_{k_i}}}{2^m} \right) < 1$$

Il faut donc noter que 2^m est souvent très petit, car on a rassemblé en J_{k_i} les valeurs propres de A voisines.

Une dernière étape consiste à retrouver :

$$14) \quad e^{\frac{A}{2^m}} = X \text{ diag } (g_{pp} \left(\frac{J_{k_i}}{2^{m_i}} \right)^{m_i}, i = 1, \dots, r) X^{-1}$$

Cet algorithme a l'avantage d'utiliser plus profondément la structure de A. Mais l'algorithme utilisé pour connaître la structure de A ou, autrement dit, l'algorithme de Bavely et Stewart introduit un grand nombre d'opérations, donc d'erreurs de calcul.

Ces erreurs sont dues en grande partie à l'erreur commise quand on a calculé X et X^{-1} et le produit $X \text{ diag } (g_{pp} \left(\frac{J_{k_i}}{2^{m_i}} \right)^{2^{m_i}}, i = 1, \dots, r) X^{-1}$.

On peut aussi utiliser l'algorithme de Ward pour calculer l'exponentielle de bloc diagonale, mais l'algorithme de Stewart et Bavely ne garantit pas que la norme de J_{k_i} soit petite.

En fait, cela arrive très souvent une fois qu'on applique au bloc "l'équilibrage" et on centre les valeurs propres autour de 0.

Le nombre de multiplications faites pendant l'exécution de notre algorithme est l'addition de multiplications pour calculer A^n et X plus celles pour calculer $g_{pp} \left(\frac{J_{k_i}}{2^{m_i}} \right)^{2^{m_i}}$.

Cela donne une estimation de $17 n^3 + \sum_{i=1}^r (p+m_i + \frac{1}{3}) k_i^3$ multiplications

4. COMMENTAIRE SUR LE CHOIX DE R

Une étude pratique du problème du choix de la borne donnée à la transformation faite pour obtenir la bloc diagonalization nous enmène à tirer certaines conclusions.

Si l'on veut séparer deux blocs on doit considérer la différence :

$$15) \quad \text{Max Re}(\lambda_i) - \text{Min Re}(\lambda_i) \text{ où la } \lambda_i \text{ sont les valeurs propres des deux blocs que l'on veut séparer.}$$

Si cette différence est petite, c'est-à-dire, s'il faut faire un nombre restreint de multiplications dans la dernière étape de la méthode par la transformation du spectre, on ne gagne rien en séparant les deux blocs.

Dans le cas où la différence 15) soit très grande, c'est-à-dire, qu'il faut faire un nombre important de multiplications à la dernière étape de l'algorithme par transformation du spectre, plus de deux, on peut avoir intérêt à détruire le bloc.

On va donner ensuite quelques exemples pour éclairer nos commentaires.

On présente un premier exemple où le choix d'un R plus important permet d'augmenter la précision du résultat.

Soit A la matrice triangulaire supérieure de taille 5x5

-12.0000000000000000	1.0000000000000000	33.0000000000000000
15999.00000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	-12.0000000000000000	-32.0000000000000000
63.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000
1.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
20.0000000000000000	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	-40.0000000000000000	

L'exponentielle de A est égale à :

0.614421235332820972d-05	0.614421235332820972d-05	485165195.409790280
0.0000000000000000	0.614421235332820972d-05	-485165195.409784136
0.0000000000000000	0.0000000000000000	485165195.409790280
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
243067762900.301866	0.0000000000000000	
485165195.409777992	0.0000000000000000	
485165195.409790280	0.0000000000000000	
485165195.409790280	0.0000000000000000	
0.0000000000000000	0.626835625529158890d-17	

Les valeurs propres de A sont $\{-20, -20, -12, -12, -40\}$.

Si l'on pose pour R une borne de 10 on obtient une décomposition en un bloc 4x4 qui regroupe les deux valeurs propres de multiplicité deux -20 et -12.

```

block structure
  4  -3  -2  -1   1
-----
caract. de valeur propre
  0   0   0   0   0
-----
pré. réel  pré. imag
20.0000000000000000  0.0000000000000000
20.0000000000000000  0.0000000000000000
-12.0000000000000000  0.0000000000000000
-12.0000000000000000  0.0000000000000000
-40.0000000000000000  0.0000000000000000

```

La norme de X est égale à : 1,735 et celle de $X^{-1} = 1,972$

La matrice $e^{\overline{A}}$ calculée par la méthode de Bloc diagonalization suivie de l'algorithme par transformation du spectre est la suivante :

```

mat exp
0.586352825848734938d-05  0.764218857511878014d-04  485165195.409860843
-0.862519659861060717d-09  0.628986504125350621d-05  -485165195.409783983
-0.261877630691742525d-09  0.134974129650800023d-06  485165195.409790409
-0.560852697617519880d-09  0.140282850225048605d-06  0.140864926834183279d-06
0.000000000000000000  0.000000000000000000  0.000000000000000000
-----
243067762900.301861  0.000000000000000000
485165195.409777609  0.000000000000000000
485165195.409790644  0.000000000000000000
485165195.409790270  0.000000000000000000
0.000000000000000000  0.424835425529158890d-17
-----
mat. diff.
0.280684094840860341d-06  0.702776733978595916d-04  0.705629936419427395d-04
0.862519659861060717d-09  0.145652687925296489d-06  0.153027940541505814d-06
0.261877630691742525d-09  0.134974129650800023d-06  0.128755345940589905d-06
0.560852697617519880d-09  0.140282850225048605d-06  0.140864926834183279d-06
0.000000000000000000  0.000000000000000000  0.000000000000000000
-----
0.473856925964355469d-05  0.000000000000000000
0.382424332201480865d-06  0.000000000000000000
0.364030711352825165d-06  0.000000000000000000
0.101863406598567963d-07  0.000000000000000000
0.000000000000000000  0.000000000000000000

```

On observe ici des erreurs très importantes dues à la forme triangulaire de A qui est complètement détruite par la bloc diagonalization et par le calcul approché de X et X^{-1} .

Si maintenant, on pose R égal à 1.000 on obtient une décomposition en deux blocs 2x2 correspondant respectivement aux valeurs propres.

block structure				
2	-1	2	-1	1
caract. de valeur propre				
0	0	0	0	0
prt. reel		prt. imag		
20.0000000000000000	0.0000000000000000	20.0000000000000000	0.0000000000000000	
-12.0000000000000000	0.0000000000000000	-12.0000000000000000	0.0000000000000000	
-12.0000000000000000	0.0000000000000000	-12.0000000000000000	0.0000000000000000	
-40.0000000000000000	0.0000000000000000	-40.0000000000000000	0.0000000000000000	

La norme de la matrice de transformation X est 1,732 et celle de X^{-1} est 1196,59.

La matrice $e^{\overline{A}}$ calculée par la méthode de Bloc diagonalization suivie de l'algorithme par transformation du spectre est la suivante :

mat exp		
0.614428782274344562d-05	0.615224974841896808d-05	485165195.409790302
0.553990567223981342d-10	0.613565854469107020d-05	-485165195.409784141
-0.548776683879028426d-10	0.855175121265196223d-08	485165195.409790286
0.260694167247616269d-12	0.102871224378221450d-11	0.318900795572582804d-10
0.000000000000000000	0.000000000000000000	0.000000000000000000
	243067762900.301844	0.000000000000000000
	485165195.409777524	0.000000000000000000
	485165195.409790740	0.000000000000000000
	485165195.409790276	0.000000000000000000
	0.000000000000000000	0.424835425529158890d-17
mat. diff		
0.754694152359056330d-10	0.803739509075836314d-08	0.213622115552425385d-07
0.553990567223981342d-10	0.855380863713951473d-08	0.535510480403900146d-08
0.548776683879028426d-10	0.855175121265196223d-08	0.541331246495246887d-08
0.260694167247616269d-12	0.102871224378221450d-11	0.318900795572582804d-10
0.000000000000000000	0.000000000000000000	0.000000000000000000
	0.160932540893554688d-05	0.000000000000000000
	0.467407517135163280d-06	0.000000000000000000
	0.459607690572738647d-06	0.000000000000000000
	0.413274392485618591d-08	0.000000000000000000
	0.000000000000000000	0.000000000000000000

On remarque que la précision a augmenté, et particulièrement dans les coefficients de $e^{\overline{A}}$ dont le calcul, dans le cas précédent, était très mauvais.

On constate alors que lorsque la différence $\lambda_{\max} - \lambda_{\min}$ est importante, dans notre cas 32, on a intérêt à séparer les deux blocs.

On remarque aussi que R est seulement une borne pour les transformations partielles, mais le conditionnement de X peut être plus grand que R.

Soit maintenant A la matrice donnée par :

mat.: 1		
1.000000000000000000 9999.0000000000000000	1.000000000000000000 0.000000000000000000	3.000000000000000000
0.000000000000000000 3.000000000000000000	1.000000000000000000 0.000000000000000000	-2.000000000000000000
0.000000000000000000 1.000000000000000000	0.000000000000000000 0.000000000000000000	3.000000000000000000
0.000000000000000000 3.000000000000000000	0.000000000000000000 0.000000000000000000	0.000000000000000000
0.000000000000000000 0.000000000000000000	0.000000000000000000 -5.000000000000000000	0.000000000000000000

La matrice exponentielle de A est la suivante

mat ce		
2.71828182845904524	2.71828182845904524	20.0855369231876678
0.000000000000000000	2.71828182845904524	-17.3672550947286225
0.000000000000000000	0.000000000000000000	20.0855369231876678
0.000000000000000000	0.000000000000000000	0.000000000000000000
0.000000000000000000	0.000000000000000000	0.000000000000000000
	86850.9244469093823	0.000000000000000000
	14.6489732662695773	0.000000000000000000
	20.0855369231876678	0.000000000000000000
	20.0855369231876678	0.000000000000000000
	0.000000000000000000	0.673794699908546706d-02

Si on choisit $R = 10$, on décompose A dans un bloc 1×1 de valeur propre -5 et un bloc 4×4 de valeurs propres $\{3, 1\}$, c'est-à-dire

```

block structure
4 -3 -2 -1 1
caract. de valeur propre
0 0 0 0 0
prt. reel prt. imag
3.0000000000000000 0.0000000000000000
3.0000000000000000 0.0000000000000000
1.0000000000000000 0.0000000000000000
0.9999999999999999 0.0000000000000000
-5.0000000000000000 0.0000000000000000

```

La norme de X est 1,7323 et celle de X^{-1} est 1,971.

La matrice exponentielle de A calculée par la méthode par transformation du spectre est la suivante :

```

mat. exp
2.71828182845904521 2.71828182845905342 20.0855369231876758
-0.515923819435529956d-17 2.71828182845904584 -17.3672550947286217
0.483835621085716320d-17 0.630893856037526013d-15 20.0855369231876669
0.224575893451391433d-21 0.109097843606353884d-17 0.102999206386122921d-17
0.000000000000000000 0.000000000000000000 0.000000000000000000

```

```

86850.9244469093811 0.000000000000000000
14.6489732662695778 0.000000000000000000
20.0855369231876705 0.000000000000000000
20.0855369231876675 0.000000000000000000
0.000000000000000000 0.673794699908545706d-02

```

```

mat. diff
0.260208521396521054d-15 0.818138959357561646d-14 0.803523914072457046d-14
0.515923819435529956d-17 0.602816407901940465d-15 0.860422844084496319d-15
0.483835621085716320d-17 0.630893856037526013d-15 0.888178419700125232d-15
0.224575893451391433d-21 0.109097843606353884d-17 0.102999206386122921d-17
0.000000000000000000 0.000000000000000000 0.000000000000000000

```

```

0.11652900864656430d-11 0.000000000000000000
0.508273978461204479d-15 0.000000000000000000
0.269229083471600461d-14 0.000000000000000000
0.263677968348474678d-15 0.000000000000000000
0.000000000000000000 0.000000000000000000

```

On va maintenant poser $R = 10^4$, cela permettant une décomposition de A en un bloc 1x1 et deux autres blocs 2x2 .

```

block structure
  2 -1  2 -1  1

caract. de valeur propre
  0  0  0  0  0

prt. reel  prt. imag
3.0000000000000000  0.0000000000000000
3.0000000000000000  0.0000000000000000
1.0000000000000000  0.0000000000000000
.9999999999999999  0.0000000000000000
-5.0000000000000000  0.0000000000000000

```

La norme de X est 1,7320 et celle de X^{-1} est 11968,897.

La matrice exponentielle de A calculée par la méthode par transformation du spectre est la suivante :

```
mat. exp
2.71828182845904524 2.71828182845904332 20.0855369231876726
-0.359321387640603394d-17 2.71828182845904123 -17.3672550947286251
0.364539199380020031d-17 0.410688468620421874d-14 20.0855369231876704
0.492129728060247558d-21 0.730133741830166149d-19 0.537277319343357706d-18
0.000000000000000000 0.000000000000000000 0.000000000000000000

86850.9244469093821 0.000000000000000000
14.6489732662695770 0.000000000000000000
20.0855369231876691 0.000000000000000000
20.0855369231876677 0.000000000000000000
0.000000000000000000 0.673794699908546706d-02

mat. diff
0.260208521396521064d-17 0.312987483153115420d-14 0.479477568759989481d-14
0.359321387640603394d-17 0.400157337820949977d-14 0.252228793407027752d-14
0.364539199380020031d-17 0.410688468620421874d-14 0.262290189567693233d-14
0.492129728060247558d-21 0.730133741830166149d-19 0.537277319343357706d-18
0.000000000000000000 0.000000000000000000 0.000000000000000000

0.142108547152020037d-12 0.000000000000000000
0.256739074444567450d-15 0.000000000000000000
0.134267597040604869d-14 0.000000000000000000
0.312250225675825277d-16 0.000000000000000000
0.000000000000000000 0.000000000000000000
```

On remarque qu'on n'a pas amélioré la précision, même si on a calculé avec plus de précision l'exponentielle du bloc.

Cela est dû à ce que pour $R = 10$, le bloc 4×4 a une différence $\lambda_{\max} - \lambda_{\min}$ très petite, donc dans la dernière étape de l'algorithme par transformation du spectre, il y a peu de produits matricielles.

5. EXEMPLE DE L'APPLICATION DE LA MÉTHODE DE BLOC DIAGONALIZATION SUIVIE DE LA MÉTHODE PAR TRANSFORMATION DU SPECTRE.

Soit A la matrice 8×8 suivante :

	-186.050061000000000	-212.005634722222222	-301.286224444444444
	1093.091360156666667	981.953325129066420	890.353630020202020
*	-393.583263333333333	1256.11230967195767	
	-174.267256052910053	-225.120184034391534	-300.115191269341270
	1087.608339961431148	981.711121475615943	890.255215471487360
*	-392.962891481481482	1255.35233664527169	
	-174.525059750000000	-213.317171655844156	-313.132383560606061
	1088.77568364826340	982.922075390622950	891.461090031332809
*	-392.676063681818182	1256.50248502740416	
	-177.788190666666666	-217.543655588023085	-307.241692491582492
	1108.255283233333333	1000.51353144624991	907.503047720966884
*	-410.570623396666666	1279.41146405109485	
	-56.600030000000000	-72.250040000000000	-108.333393333333333
	338.683433333333333	348.065519845259596	315.375356949494949
*	-150.500000000000000	443.702142341269841	
	-35.100026000000000	-42.900032500000000	-61.750043333333333
	211.750111333333333	195.330014381313131	177.142808949494949
*	-78.000000000000000	252.614104321428571	
	-46.666666666666667	-55.533333333333333	-74.200000000000000
	269.733235650666667	243.824733720533721	219.209792760942761
*	-93.333286666666667	309.756429629629630	
	-41.250000000000000	-47.357142857142857	-62.000000000000000
	226.107135357142857	202.615216630591031	185.595289096320346
*	-74.999962500000000	259.652169217687075	

(où on lit dans les lignes astérisquées les colonnes 4 et 5).

La matrice exponentielle de A est la suivante :

mat. ee		
-27.71677149271432604	-32.3331126314821532	-40.4672199599624392
153.820933690441924	144.335144865438957	130.690879396158625
-28.3063007686933426	-33.5736218964224049	-41.3156163461162360
157.092883042307672	147.325145003921265	133.471423273949767
-28.7845016369931157	-34.1427407904690842	-42.0036425991346803
159.705835394313378	149.748868045663767	135.727585622552758
-29.1908908252420367	-34.6234676338259941	-42.5931439152728184
161.949196049454642	151.825506585084802	137.660532156920403
-141767609721590025	-185245568595853419	-263463512591743561
1.03255636449650740	957352215512569942	869552311870696642
-0.757106613076143743d-01	-0.986503642494070421d-01	-1.42268529614512224
572873123857293663	505349323951939296	458965191025031482
-17.2908573520932213	-20.7543934320289317	-25.9561194137782637
98.6542544739535978	95.8247775291684819	80.1613680469966278
-15.873648752945824	-18.5248934222173711	-22.2430404650713998
84.4876553620631023	75.6851372845329312	75.9551807244499647

-52.7643757351521046	174.140698441725317
-53.8530996807738062	177.787089516275288
-54.7358870961425438	180.744324383763963
-55.5014990023949987	183.283993312078334
-469728234737135957	1.23327057906090055
-245708766587433255	650246265023836061
-34.6471004631364529	111.600953948944901
-27.8414200150203639	95.6581964255929005

Si l'on pose $R = 10^3$, on obtient une décomposition en trois blocs ; deux de taille 3x3 et un 2x2.

La norme de X est 2,4266 et celle de X^{-1} est 561,5.

Les valeurs propres calculées sont les suivantes :

prt. reel	prt. imag
-12.0000059325823174	0.000000000000000000
-11.9999970337035922	0.513777276245967493d-05
-11.9999970337085922	-0.513777276245967493d-05
-6.00000553127230025	0.269000535262049580d-04
-6.00000553127230025	-0.269000535262049580d-04
-5.99995893245539733	0.000000000000000000
2.00000000000000003	0.639666527686958811d-16
2.00000000000000003	-0.639666527686958811d-16

La matrice exponentielle de A calculée par la méthode de bloc diagonalization suivie de la méthode par transformation du spectre est donnée par :

-27.7167714971432811	-32.8831126314821302	-40.4672199599824811
153.270933690442081	144.335144865439097	130.690879396158750
-28.3063007636983643	-33.5786218964224330	-41.3156163461162794
157.022363042307335	147.325145003921410	133.471423273949897
-28.7845016369931377	-36.1427407904691128	-42.0036425991847244
159.705835394313543	149.748363045063915	135.727585622552890
-29.1906908252420590	-34.6234676388260231	-42.5931439152728631
161.942136049454909	151.325506535084952	137.660532156920537
-14.1767609721590444	-185245568595854089	-268463512691744840
1.03255636449651251	.957352215512574418	.869552311870700343
-0.757106613076152761d-01	-0.986503642494076116d-01	-0.142268529614513169
.572873123357297386	.503349323951942632	.458965191025034290
-17.2908573520932340	-20.7543934320239481	-25.9561194137782890
98.6542544739535923	95.8247775291685642	80.1613680469967033
-15.8736487529453942	-18.5248984222173862	-22.2430404650714227
84.4370353620631880	75.0851372445330077	75.9551807244500337

-52.7643757351521698	174.140698441725499
-53.8530996807738736	177.787089516275477
-54.7358870961426123	180.744324383764155
-55.5014990023950681	183.283993312078529
-4.69728234737138584	1.23327057906090653
-245708766587435000	.650246265023840379
-34.6471004631364918	111.600953948945011
-27.8414200150203987	95.6581964255930000

La matrice de différences est la suivante :

mat. diff
0.207368844315267520d-13 0.270051750740069323d-13 0.418276524527527727d-13
0.156735735501456475d-12 0.139804834375922337d-12 0.124872334694714482d-12
0.216944517905659495d-13 0.221649703559594400d-13 0.434397202628436207d-13
0.162703184258816691d-12 0.145106149318507960d-12 0.129923849456758944d-12
0.220205798040495893d-13 0.235951817780016831d-13 0.440619762393109002d-13
0.165117919337376406d-12 0.147354350943373902d-12 0.131811228598621710d-12
0.223328300297254145d-13 0.290045765133322146d-13 0.446864767411625508d-13
0.167477143264704364d-12 0.149408263538930441d-12 0.133754118891715734d-12
0.413935719443398213d-15 0.662576156672735401d-15 0.127914172309839813d-14
0.510354379631712772d-14 0.447688761062714491d-14 0.370027359447577808d-14
0.401818977650284012d-15 0.569517848679479410d-15 0.944773773103868564d-15
0.322303184009797368d-14 0.333663213532413990d-14 0.280813783684608076d-14
0.126669508215825454d-13 0.164208924235964560d-13 0.252992071736457547d-13
0.944661016077930071d-13 0.842936331446650103d-13 0.755090434623184592d-13
0.117995890835942419d-13 0.151371970513736137d-13 0.229469221402212042d-13
0.856953397132542705d-13 0.764804886088654712d-13 0.690003609804534790d-13

0.652047860150162251d-13 0.182409642945913220d-12

0.673905375947470020d-13 0.189182003396126674d-12

0.684036161047174573d-13 0.192068583260152081d-12

0.693820001451683765d-13 0.194816385246099344d-12

0.262691344371512869d-14 0.597980866212655116d-14

0.174580944319047138d-14 0.431859409344426126d-14

0.389430114826312729d-13 0.109995346164737384d-12

0.347881445872388895d-13 0.994898607942218405d-13

Maintenant, on prend un deuxième exemple qu'on va traiter par la méthode de bloc diagonalization suivie de la méthode de Ward.

17.18057382088	0.66627076160585	12.755278277707	0.261129945078203-01	8.7232663150350	-0.41248076027493
-3.1748057177441	-0.77731742720950	0.73267128247243	0.607215196478110-01		
-4.9748055823970-01	-15.443758030681	0.45620498851485	10.514410370307	-5.6850787160019	10.466013516588
-4.71835546831840-01	-1.3756383428832	-1.1771550123863	2.1463618474485		
17.805189340502	0.14337284367147	-17.1836296522251	0.47781080836727	8.7620647899820	0.349113772795960-01
-2.1048563016770	0.10048214052294	0.72985045506153	0.46488508435840		
-2.5025448722410-01	10.507783367069	-4.7753045348873	-13.442525229900	0.48734664409139	6.5273863047703
-2.734089011060-01	-5.3543412192361	-5.54649549513850-01	1.7934854447767		
8.0172122683171	-0.22586827857594	8.8679564504461	0.11209533303304	-15.184826100368	0.68359143125163
-1.1773848800768	-0.27417959670460	-3.2116921396027	0.12221040779695		
0.42158209955010	10.655668161902	-3.45584228946500-01	6.5048227449055	-8.71358775707070-01	-13.439538806547
0.33723423795633	-5.3824737933143	0.32323388705710	-1.8037971912406		
-3.1002210017597	-0.35540092407824	-3.1806316625908	0.250061727224760-01	-7.1931779345572	-0.34035128132510
-0.1934176824226	0.69226371294203	-15.138403622563	0.17276669479891		
0.28565717543858	-1.5024657640368	-1.11136427685868	-5.5206667350841	-1.2352447192862	-5.4965862066890
0.30315627043673	-7.4392071616527	0.36885404394725	-13.781012700525		
0.93103154592894	0.12778477440358	0.91704570774624	0.46261582047035	-3.2379087995432	0.733781479258190-01
-15.308029859674	0.20486349890473-01	-1.1.164306764522	0.50394898831399		
0.34454890489252	2.1726897859302	-7.31157094325730-01	-1.8823054432760	-1.2401088949020	-1.8784485727167
0.22623556311699	-13.899128248833	0.29444476346572	-9.2382167434762		

Un $R = 10^3$ nous a permis de décomposer A en cinq blocs, deux 3x3 ;
un 2x2 et deux 1x1.

BLOCK STRUCTURE

3 -2 -1 3 -2 -1 2 -1 1 1

CARACT. DE VALEUR PROPRE

0 1 2 0 1 2 1 2 0 0

PRT. REFL PRT. IMAG

-30.000	0.0
-30.000	0.200660-04
-30.000	-0.200660-04
-20.000	0.0
-20.000	0.783960-05
-20.000	-0.783960-05
10.000	0.881910-07
10.000	-0.881910-07
1.0000	0.0
0.10000	0.0

La matrice exponentielle de A calculée est la suivante :

3577.305330911	3525.7416736504	3541.0702941421	3489.8824101790	3506.9850523200	3455.0721107677
-5230.1700731630	-5100.1706299211	3437.6210270246	3386.5058507550		
-7065.4475803194	3471.8206055226	-18.055370930989	3454.6376939069	-35.152795424219	3437.6253312275
79.278918971777	-5109.5653464509	-59.831560254795	3403.0421022200		
3505.1879480272	3560.2259857462	3559.5898687582	3524.6050106492	3524.3451181136	3489.5356070227
-5255.9306834745	-5160.2593087980	3454.4649743585	3420.4535901179		
17.135462257470	3506.0708384742	-34760844267814	3489.539074305	-17.706833809536	3472.2611359185
52.340410048160	-5150.0004607283	-51.903303185075	3437.1595806814		
3413.2498150778	3505.3610141630	3577.3860706089	3559.6757052387	3541.8783005363	3524.3445907386
-5281.9486348022	-5211.8601526914	3471.4777822635	3454.7416559711		
35.337638644989	3542.4915427378	17.537493463980	3524.7799554922	-850764321526110-01	3507.2441645532
26.102368025209	-5211.7683178400	-34.805521238874	3471.6190868651		
-5424.3765130437	-5424.3751065623	-5370.4026252844	-5370.6697447123	-5316.9644542003	-5317.4974352654
7930.0127810196	7863.7898174078	-5212.1150069545	-5212.7254404744		
-00.506123852060	-5388.2003052357	-53.387653409742	-5361.2253301189	-26.449320159188	-5334.4209786254
0.522272629471907-02	7029.4920311475	26.630133092731	-5282.6870395906		
3649.468309897	3667.0883404379	3613.0678499225	3630.868668536	3577.0283648332	3595.0084826155
-5335.2128045348	-5316.6211480870	3506.6809255657	3524.3524249619		
72.167556182171	3613.4743187118	53.831020444988	3595.2290177748	35.676501845935	3577.1648112091
-26.878165938771	-5318.1466160860	-937854518276240-01	3543.2061278474		

La matrice exponentielle exacte est :

MAT EXP

3577.3053539815	3525.0416736507	3541.9702941426	3489.8824101294	3506.9859523294	3455.0721197681
-5230.1709731636	-5109.1706209217	3437.6210270251	3386.5058503554		
-78654475800595	3471.8206055228	-18.055370030865	3454.6376930071	-35.152795424193	3437.6253312277
78.228918871740	-5108.5653464512	-68.831560254778	3403.0421022212		
3595.1879480776	3560.0259850466	3559.5898687586	3524.6050106496	3524.3451181140	3489.5356070231
-5255.9306834351	-5160.2503087985	3454.4649743599	3420.4535901193		
17.18546257507	3506.9798384744	-34769844265187	3489.5339074307	-17.706833809508	3472.2611359187
52.340410749121	-5159.9094607287	-51.903303135053	3437.1595808916		
3617.2409150782	3595.3610141634	3577.3360706004	3559.6757052391	3541.8783095367	3524.3445907390
-5281.9486248028	-5211.8601526920	3471.4777822640	3454.7416559715		
35.337638645020	3542.4915427380	17.537403464010	3524.7709554924	-850764321215370-01	3507.2441645535
26.122368925164	-5211.7693178404	-34.805521238848	3471.6190888653		
-5424.3765130444	-5424.3751065629	-5370.4026252851	-5370.6697447129	-5316.9444542900	-5317.4074352660
7930.0127910705	7863.7898174087	-5212.1150069552	-5212.7254404750		
-92.596123853712	-5388.2093952360	-53.387693409783	-5361.2253301192	-26.449320150231	-5334.4200796257
0.5222726354170-02	7920.4329311480	26.630133092696	-5282.6870395910		
3648.4696300001	3667.0883404383	3613.0678479530	3632.869668540	3577.0283648337	3505.0084826150
-5335.2129045354	-5316.6211403876	3506.680925661	3524.3524249623		
72.167556162190	3613.4742180120	53.931029444915	3595.2290177751	35.676501845963	3577.1648112004
-26.998165038810	-5319.1464160863	-937854518051560-01	3543.2061278476		

On observe une perte générale de deux à trois chiffres significatifs exacts, ce qui n'est pas important étant donné la taille de A et e^A .

En conclusion, on peut dire que cette méthode de bloc diagonalisation suivie d'une méthode par transformation du spectre ou de celle de Ward est très performante. On a ainsi que la méthode de bloc diagonalisation suivie par la méthode par transformation du spectre appliqué au bloc, semble être le moyen le plus intéressant de calculer l'exponentielle d'une matrice.

CHAPITRE 5

DÉVELOPPEMENT EN SÉRIE DE POLYNÔMES DE TCHÉBICHEFF

1. Introduction

Si x est un nombre réel tel que $|x| \leq 1$, on peut s'en servir du développement en série de polynômes de Tchebicheff de la fonction exponentielle :

$$1) \quad e^x = c_0 + \sum_{i=1}^{\infty} c_i T_i(x) \quad ; \quad |x| \leq 1$$

où $T_i(x)$ est le polynôme de Tchebicheff de degré i défini par :

$$2) \quad T_i(x) = \cos i \theta; \quad x = \cos \theta$$

Les coefficients sont donnés par :

$$3) \quad c_i = \int_{-1}^1 (1-x^2)^{-1/2} T_i(x) e^x dx$$

Soit α un nombre réel non négatif tel que $\lambda = \alpha x$ et $|x| \leq 1$. Si on a que $|\lambda| > 1$, alors on peut écrire :

$$4) \quad e^\lambda = e^{\alpha x} = c_0(\alpha) + \sum_{i=1}^{\infty} c_i(\alpha) T_i(x)$$

Dans Yudell Luke [7] on trouve un calcul de $c_i(\alpha)$. Il résulte :

$$5) \quad e^\lambda = e^{\alpha x} = I_0(\alpha) + 2 \sum_{i=1}^{\infty} I_i(\alpha) T_i(x)$$

où $I_i(\alpha)$ sont des fonctions de Bessel.

On calcule une somme partielle du développement en série de polynômes de Tchébicheff de e^x définie par :

$$6) \quad p_n(\lambda) = I_0(\alpha) + \sum_{i=1}^n 2I_i(\alpha) T_i(x); \text{ si } \lambda = \alpha x$$

Étudions maintenant une borne théorique d'erreur :

Lemme:

Soit $p_n(\lambda)$ définie en 6). Si n est tel que $\left| \frac{\alpha}{2(n+1)} \right| < 1$, alors :

$$7) \quad |p_n(\lambda) - e^\lambda| \leq 2I_{n+1}(\alpha) \left[1 - \frac{\alpha}{2(n+1)} \right]^{-1}$$

Démonstration :

$$|p_n(\lambda) - e^\lambda| \leq \sum_{i=n+1}^{\infty} |I_i(\alpha)| |T_i(x)|$$

Mais $|T_i(x)| < 1$ et :

$$8) \quad I_i(\alpha) = \frac{\left(\frac{\alpha}{2}\right)^i}{\Gamma(i+1)} e^\alpha {}_1F_1\left(\frac{1}{2}+i, 1+2i, 2\alpha\right)$$

$$\text{où } {}_1F_1\left(\frac{1}{2}+i, 1+2i, 2\alpha\right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{2}+i\right) \left(\frac{1}{2}+i+1\right) \dots \left(\frac{1}{2}+i+k-1\right) (\alpha)^k}{(i+1)! (1+2i+1) \dots (2i+k) k!}$$

donc $I_i(\alpha) > 0$.

En plus les I_i , $i=1, \dots$, réalisant une relation à trois termes :

$$9) \quad I_{i-1}(\alpha) = \frac{2i}{\alpha} I_i(\alpha) + I_{i+1}(\alpha)$$

D'où il vient :

$$10) \quad |p_n(\lambda) - e^\lambda| \leq \sum_{i=n+1}^{\infty} 2I_i(\alpha) \leq 2I_{n+1}(\alpha) \left[1 - \frac{\alpha}{2(n+1)} \right]^{-1}$$

Donc, pour n suffisamment grand, l'erreur dépend de $I_{n+1}(\alpha)$.

2. Application au calcul de l'exponentielle d'une matrice

Si la matrice A a des valeurs propres réelles, on peut s'en servir du développement en série de polynômes de Tchébicheff de la fonction exponentielle.

En effet si on écrit :

$$11) \quad e^A = e^{\alpha \frac{A}{\alpha}}$$

où on choisit α tel que $\rho(\frac{A}{\alpha}) \leq 1$, il est possible de développer l'exponentielle de la matrice A en série de polynômes de Tchebicheff de la façon suivante :

$$12) \quad e^A = e^{\alpha \frac{A}{\alpha}} = I_0(\alpha) + 2 \sum_{i=1}^{\infty} I_i(\alpha) T_i\left(\frac{A}{\alpha}\right)$$

Cette expression est valable car, si on écrit $A = XJX^{-1}$, où J est la forme de Jordan de A , on trouve que :

$$13) \quad I_0(\alpha) + 2 \sum_{i=1}^{\infty} I_i(\alpha) T_i\left(\frac{A}{\alpha}\right) = X \operatorname{diag}\{I_0(\alpha) + 2 \sum_{i=1}^{\infty} I_i(\alpha) T_i\left(\frac{J_{k_i}}{\alpha}\right)\} X^{-1}$$

et, suivant le même raisonnement fait dans le chapitre 1, on prouve que :

$$14) \quad e^{\begin{pmatrix} J_{k_i}/\alpha \end{pmatrix}} = I_0(\alpha) + 2 \sum_{i=0}^{\infty} I_i(\alpha) T_i\left(\frac{J_{k_i}}{\alpha}\right)$$

si $\rho(\frac{A}{\alpha}) \leq 1$.

En particulier, si J est diagonale, on a :

$$15) \quad e^A = X \operatorname{diag}\{I_0(\alpha) + 2 \sum_{i=1}^{\infty} I_i(\alpha) T_i\left(\frac{\lambda_i}{\alpha}\right)\} X^{-1}$$

où les λ_i sont les valeurs propres de A .

Dans la pratique, on calcule $p_n(A)$ définie par :

$$16) \quad \begin{aligned} p_n(A) &= I_0(\alpha) + 2 \sum_{i=1}^{\infty} I_i(\alpha) T_i\left(\frac{A}{\alpha}\right) \\ &= 2e^{\alpha} \left(\frac{e^{-\alpha}}{2} I_0(\alpha) + \sum_{i=1}^{\infty} e^{-\alpha} I_i(\alpha) T_i\left(\frac{A}{\alpha}\right)\right) \end{aligned}$$

Si A possède seulement des valeurs propres simples ou semi simples, l'erreur théorique commise lorsqu'on approche e^A par $p_n(A)$ est directement en relation avec l'erreur commise sur les valeurs propres.

$$17) \quad \|p_n(A) - e^A\| \leq \|X\| \|X^{-1}\| \max_{\lambda \in \sigma(A)} |p_n(\lambda) - e^{\lambda}|$$

3. Calcul de $p_n(A)$. Méthode de Clenshaw

On a donc vu que, pour approcher e^A , on calcule $p_n(A)$. Pour effectuer cette tâche on va utiliser l'algorithme de Clenshaw matriciel.

On va introduire l'algorithme de Clenshaw "scalaire" pour après le considérer dans le cas matriciel.

Lemme : Fox [8]

Fox

$$\text{Si } p(x) = \sum_{r=0}^n a_r \phi_r(x) \text{ où } \phi_r(x), r=1, \dots$$

réalisent la relation à trois termes suivants :

$$\phi_{r+1}(x) + \alpha_r(x) \phi_r(x) + \beta_r(x) \phi_{r-1}(x) = 0$$

Alors

$$p(x) = b_0(x) \phi_0(x) + b_1(x) \{\phi_1(x) + \alpha_0(x) \phi_0(x)\}$$

$$\text{avec : } \begin{cases} b_r(x) = a_r - \alpha_r(x) b_{r+1}(x) - \beta_{r+1}(x) b_{r+2}(x) \\ r = n, n-1, \dots, 0 \\ \text{où} \\ b_{n+1}(x) = b_{n+2}(x) = 0 \end{cases}$$

Ce procédé, appliqué au cas $\phi_r(x) = T_r(x)$, polynôme de Chebicheff de degré r , nous donne :

$$p_n(x) = \frac{a_0}{2} + \frac{1}{2}(b_0 - b_2) \quad \text{où}$$

$$18) \begin{cases} b_{n+1} = b_{n+2} = 0 \\ \text{et} \\ b_r(x) = a_r + 2xb_{r+1}(x) - b_{r+2}(x) \\ r = n, n-1, \dots, 0 \end{cases}$$

Donc, dans le cas matriciel, pour calculer

$$\begin{aligned} 19) \quad p_n(A) &= \frac{e^{-\alpha}}{2} I_0(\alpha) + \sum_{i=1}^n e^{-\alpha} I_i(\alpha) T_i\left(\frac{A}{\alpha}\right) \\ &= \frac{c_0(\alpha)}{2} + \sum_{i=1}^n c_i(\alpha) T_i(D); \quad \left(\frac{A}{\alpha} = D\right) \end{aligned}$$

on utilise l'algorithme suivant :

$$20) \quad \begin{cases} B_{n+1} = B_{n+2} = \bar{O} \\ B_r = 2\bar{D}B_{r+1} - B_{r+2} + \bar{a}_r I \\ r = n, n-1, \dots, 0 \end{cases}$$

et

$$21) \quad p_n(A) = \frac{1}{2}(B_0 - B_2)$$

Si on applique ce schéma pour obtenir $p_n(A)$ dans un ordinateur on va avoir un résultat qu'on notera $\overline{p_n(A)}$.

Dans le paragraphe suivant on fera une étude de la différence $\|p_n(A) - \overline{p_n(A)}\|$.

4. Erreur d'arrondi dans la méthode de Clenshaw matricielle

On va suivre une étude due à Fox [9] dans le cas scalaire.

Soit $\bar{B}_r$ le B_r calculé par notre ordinateur.

Soit :

$$22) \quad \overline{M_r} = \overline{2\bar{D}B_{r+1} - \bar{B}_{r+2} + \bar{a}_r I} - 2\bar{D}\bar{B}_{r+1} - \bar{B}_{r+2} + \bar{a}_r I \\ r < n$$

Autrement dit, M_r est l'erreur d'arrondi commise dans le pas r de la méthode de Clenshaw matricielle.

Alors :

$$\bar{B}_n = \bar{a}_n I = B_n + IM_n; M_n = (a_n - \bar{a}_n)I$$

si on note $E_n(n) = I$ on peut écrire :

$$B_n = B_n + E_n(n)M_n$$

$$\begin{aligned} \text{Il en résulte : } \bar{B}_{n-1} &= \overline{2\bar{D}B_n + \bar{a}_{n-1}I} = 2\bar{D}\bar{B}_n + \bar{a}_{n-1}I + M_{n-1} \\ &= 2\bar{D}(B_n + E_n(n)M_n) + \bar{a}_{n-1}I + E_{n-1}(n-1)M_{n-1} \\ &= 2\bar{D}B_n + 2\bar{D}E_n(n)M_n + \bar{a}_{n-1}I + E_{n-1}(n-1)M_{n-1} \end{aligned}$$

où $E_{n-2}(n-1) = I$.

Si on note $E_n(n-1) = 2\overline{DE}_n(n)$ on trouve :

$$\overline{B}_{n-1} = B_{n-1} + E_n(n-1)M_n + E_{n-1}(n-1)M_{n-1}$$

$$\begin{aligned} \text{Il vient alors : } \overline{B}_{n-2} &= \overline{2\overline{DB}_{n-1} - \overline{B}_n + \overline{a}_{n-2}I} = \\ &= 2\overline{DB}_{n-1} - \overline{B}_n + \overline{a}_{n-2}I + I M_{n-2} \end{aligned}$$

Donc, si on note :

$$23) \quad \begin{cases} E_n(n-2) = 2\overline{DE}_n(n-1) - E_n(n) \\ \text{et} \\ E_{n-1}(n-2) = 2\overline{DE}_{n-1}(n-1), E_{n-2}(n-2)I \end{cases}$$

$$\overline{B}_{n-2} = B_{n-2} + E_n(n-2)M_n + E_{n-1}(n-2)M_{n-1} + E_{n-2}(n-2)M_{n-2}$$

Donc, dans le cas général, on trouve que :

$$\overline{B}_S = B_S + E_n(S)M_n + E_{n-1}(S)M_{n-1} + \dots + E_S(S)M_S$$

où les $E_r(S)$ sont obtenues à partir de la récurrence suivante :

$$\begin{cases} E_S(S+1) = \overline{0}; E_S(S) = I \\ E_S(r-2) = 2\overline{D} E_S(r-1) - E_S(r) \\ r = S, S-1, \dots, 0. \end{cases}$$

On peut réécrire cette relation récurrente et trouver $E_S(r)$ donnée par :

$$24) \quad \begin{cases} E_S(r+2) = 2\overline{D} E_S(r+1) - E_S(r); r > S. \\ E_S(S-1) = 0 \\ E_S(S) = I \end{cases}$$

Dont la solution est donnée par :

$$25) \quad E_S(r) = \alpha T_r(\overline{D}) + \beta U_r(\overline{D}), \alpha \text{ et } \beta \in \mathcal{M}_{N \times N}(\mathbb{C})$$

où $U_r(X) = \sin(r+1)\theta/\sin\theta; X = \cos\theta.$

Les conditions initiales sont alors :

$$\alpha T_S(\overline{D}) + \beta U_S(\overline{D}) = I$$

et

$$\alpha T_{S-1}(\overline{D}) + \beta U_{S-1}(\overline{D}) = \overline{0}$$

d'où il vient :

$$\alpha = \frac{-U_{S-1}(\bar{D})}{U_S(\bar{D})T_{S-1}(\bar{D}) - T_S(\bar{D})U_{S-1}(\bar{D})}$$

$$\beta = \frac{T_{S-1}(\bar{D})}{U_S(\bar{D})T_{S-1}(\bar{D}) - T_S(\bar{D})U_{S-1}(\bar{D})}$$

Alors $E_r(S)$ est donnée par :

$$26) \quad E_r(S) = \frac{U_r(\bar{D})T_{S-1}(\bar{D}) - T_r(\bar{D})U_{S-1}(\bar{D})}{U_S(\bar{D})T_{S-1}(\bar{D}) - T_S(\bar{D})U_{S-1}(\bar{D})} = U_{r-S}(\bar{D})$$

$$= X \text{ diag}\{U_{r-S}(\lambda_i), i=1, \dots, r\} X^{-1}$$

Donc, si $D = X J X^{-1}$, où J est diagonale, on trouve que :

$$27) \quad \|E_r(S)\|_{1,\infty} \leq \|X\|_{1,\infty} \|X^{-1}\|_{1,\infty} \max_{\lambda \in \sigma(A)} |U_{r-S}(\lambda_i)| \leq \|X\|_{1,\infty} \|X^{-1}\|_{1,\infty}^{(r-S+1)}$$

Ce facteur d'erreur peut être très grand si le conditionnement de X est important ou, si on prend une somme partielle de très haut degré.

Un deuxième problème à éclaircir est celui de la norme de M_r .

Si on néglige l'erreur commise dans les additions de matrices on trouve que :

$$28) \quad M_r = 2\bar{D}\bar{B}_{r+1} - 2\bar{D}\bar{B}_{r+1} = \{m_{ij}\}$$

D'après Wilkinson [11]

$$|m_{ij}| \leq \beta^{-t+0.1} 2n \sum_{k=1}^N |\bar{d}_{ik}| |\bar{b}_{kj}^{r+1}|, \beta^{-t} \text{ précision machine.}$$

ou, autrement dit :

$$|M_r| \leq \beta^{-t+0.1} 2n |\bar{D}| |\bar{B}_{r+1}| \leq \beta^{-t+0.1} 2n |X| |X^{-1}| |\bar{B}_{r+1}|$$

On peut aussi écrire :

$$\|M_r\|_{1,\infty} \leq \beta^{-t+0.1} 2n \|\bar{D}\|_{1,\infty} \|\bar{B}_{r+1}\|_{1,\infty}$$

Maintenant, on calcule :

$$\begin{aligned} \overline{p(D)} - p(\bar{D}) &= \frac{1}{2}(\bar{B}_0 - \bar{B}_2) - \frac{1}{2}(B_0 - B_2) = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=0}^n E_i(0) M_i - \sum_{i=0}^n E_i(2) M_i \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n (E_i(0) - E_i(2)) M_i + \frac{1}{2} E_0(0) M_0 + \frac{1}{2} E_0(1) M_1 \end{aligned}$$

Mais, d'après 26) on peut en déduire que :

$$E_k(0) - E_k(2) = U_k(\bar{D}) - U_{k-2}(\bar{D}) = 2T_k(\bar{D})$$

Donc :

$$\begin{aligned} \overline{p_n(\bar{D})} - p_n(\bar{D}) &= \sum_{i=2}^n T_i(\bar{D}) M_i + M_1 + \frac{1}{2} M_0 \text{ et} \\ |\overline{p_n(\bar{D})} - p_n(\bar{D})|_{i,j} &\leq |x| |x^{-1}| \left(\frac{1}{2} |M_0| + \sum_{i=1}^n |M_i| \right) \\ &\leq (|x| |x^{-1}| 2n \beta^{-t+0.1} |\bar{D}| (|B_0| + \sum_{i=1}^{\infty} |\bar{B}_i|))_{i,j} \end{aligned}$$

Si on considère la norme $S_{\varphi_{\infty}\varphi_{\infty}}$ ou $S_{\varphi_1\varphi_1}$ on trouve :

$$\|\overline{p_n(\bar{D})} - p_n(\bar{D})\|_{1,\infty} \leq \|x\|_{1,\infty} \|x^{-1}\|_{1,\infty} 2n \|\bar{D}\|_{1,\infty} \beta^{-t+0.1} \left(\frac{\|\bar{B}_0\|_{1,\infty}}{2} + \sum_{i=1}^n \|\bar{B}_i\|_{1,\infty} \right)$$

Cette dernière formule d'erreur nous montre que la méthode de Clenshaw additionne les erreurs commises à chaque pas de la récurrence.

5. Exemples numériques

On a donc vu que le calcul de la somme partielle du développement en série de polynômes de Tchebicheff nous donne un algorithme théoriquement stable du point de vue numérique.

On doit calculer :

1) α et β tels que $\rho(\frac{1}{\alpha}(A-\beta I)) \leq 1$; Soit $B = A - \beta I$

$$2) p_n(B) = 2e^{\alpha} \left(\frac{e^{-\alpha}}{2} I_0(\alpha) + \sum_{i=1}^n e^{-\alpha} I_i(\alpha) T_i\left(\frac{B}{\alpha}\right) \right)$$

$$= 2e \left(\frac{c_0(\alpha)}{2} + \sum_{i=1}^n c_i(\alpha) T_i(D) \right)$$

$$3) \frac{\bar{A}}{e^{\beta}} = e^{\beta} \overline{p_n(B)}$$

où e^{β} c'est l'approximation de l'exponentielle obtenue avec cette méthode.

Le calcul de α et β est fait de la même façon que dans la méthode de trarformation du spectre.

$$\text{On prend } \alpha = (\lambda_{\max} - \lambda_{\min})/2 \text{ et } \beta = \frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{2}.$$

Soit A la matrice dont la forme de Jordan s'écrit :

$$J = \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & & & & \\ -1 & 1 & & & & & & \\ & -1 & & & & & & \\ & & 2 & & & & & \\ & & & 2 & & & & \\ 0 & & & & 10 & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & & 10 & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & 10 \end{bmatrix} ; N=8$$

La matrice A est donc :

nat. a				
14.270833333333333	-13.7103174603174603	-19.3189484126984127	-10.8877976190476190	45.4752308909674781
45.6819058641975309	41.3815999779541446	37.2818775553150553		
-11.6954365079365079	-13.9457738095238095	-16.008333333333333	-15.986111111111111	40.0367024124464681
40.2190659249811036	36.5195474086099086	32.9733019680936348		
-10.4570373015873016	-11.5947781385281385	-16.196338383838383	-14.324494949494949	36.3276130422707804
36.4323889225302916	33.1425505392124710	29.9832647816549332		
-9.459090909090909	-10.4880952380952381	-13.736111111111111	-10.977272727272727	31.1687377602556174
31.4313622334455668	28.6418309173990992	25.9370607503607504		
-2.250000000000000	-2.250000000000000	-3.500000000000000	0.000000000000000	7.66964285714285714
4.95783730158730159	4.406250000000000	3.965909090909091		
-7.100000000000000	-8.250000000000000	-11.000000000000000	-13.000000000000000	25.9867460317460317
32.8387896825396825	21.429924242424242	18.486111111111111		
-5.92857142857142857	-6.600000000000000	-8.250000000000000	-8.750000000000000	19.6721230158730159
17.3180272108843537	25.4742965367965368	14.9894841269841270		
-4.71428571428571429	-5.07142857142857143	-6.100000000000000	-6.000000000000000	14.6968537414965986
12.9258786848072562	11.5411616161616162	20.4274891774891775		

On applique ensuite une méthode d'équilibrage pour obtenir A' telle que $\|A'\|_1 \cong 145.88$.

On prend $\alpha = 6$ et $\beta = 4$.

Pour obtenir une précision de 18 chiffres il nous faut théoriquement sommer les 30 premiers termes de la série. On a alors calculé ces 30 premiers termes : $e^{-\alpha} I_i(\alpha)$ pour $\alpha = 6$; $i=1, \dots, 30$.

.166657432639816548	0.473108668708044866d-07
.152051459308505860	0.859434275928833727d-08
.115973612870314596	0.147437215460002126d-08
0.747357173949627964d-01	0.239567216554883494d-09
0.412378954753518002d-01	0.369688552707202958d-10
0.197518567611603964d-01	0.543113317365495410d-11
0.831813420675113960d-02	0.761300779687268487d-12
0.311558834765811728d-02	0.102027715844074698d-12
0.104842806221553265d-02	0.130975301640540392d-13
0.319780181750030211d-03	0.161331791966039685d-14
0.890875169654420227d-04	0.190986806770864448d-15
0.228217918652234689d-04	0.217611965698597885d-16
0.540761345962263688d-05	0.238976983207961436d-17
0.119133802673292141d-05	0.253268081143259289d-18
0.245148677113310770d-06	0.259344080758609906d-19
	0.256880307660304752d-20

Le résultat obtenu, après avoir utilisé la méthode de Clenshaw pour sommer les trente premiers termes de la série de Tchébicheff, est le suivant :

matrice exp de a				
-38709.1801789219378 143976.461898753029	-46439.2174595765721 144261.702472189515	-58187.0200109803328 137746.102848060556	-78486.4480936035658	145405.147590920902
-34179.4269958743108 126954.122432974085	-40997.4443830328382 127291.963570404635	-51354.9517849839492 121813.692694188703	-69239.5467535286593	128335.282300818684
-30603.2645747711836 113547.931133392719	-36703.2341218631330 113910.288340159890	-45965.7447885153571 109203.560585991045	-61950.9695737906244	114069.730251903296
-27707.3828666299428 102708.847693008483	-33226.4253517007534 103080.569492495785	-41604.7081410941665 98967.4282703536344	-56048.7688876226202	103967.899244667350
-5.26588249331931939 13.5470980917070194	-6.74526707688059038 12.0515125341055635	-10.0259307550281709 10.8553650647920462	0.183904256964673528d-12	22.8615461439801904
-28948.8486026526915 121473.151162570704	-35241.8486344451597 111054.599320683260	-45153.5007264993610 91622.4217181118608	-63315.0055759209044	112692.730578610199
-20452.9628697427907 65541.1868940509675	-24228.7077069020958 80655.2245417536328	-29735.1402158831807 75077.4354921883230	-38538.9260848128172	74345.3326419196827
-9439.75624944237484 29224.7805262970579	-11012.8912950651258 26132.3220203496707	-13215.3959781899169 45665.1801225579512	-16514.3075540308365	33167.0522604121051

On a aussi calculé la différence entre le calcul de l'exponentielle de la matrice A et le résultat exact. On a obtenu :

0.64233063312713058d-11 0.743227701605064794d-11 0.868283223098842427d-11 0.127755583889666013d-10 0.215152340368158336d-10
 0.23963070311583579d-10 0.226521024160319939d-10 0.233058017329312861d-10
 0.561338761250479147d-11 0.655830945106572472d-11 0.751754214434185997d-11 0.115960574476048350d-10 0.192841298485291190d-10
 0.198099314729915932d-10 0.200373051484348252d-10 0.201936245503020473d-10
 0.506261699229071382d-11 0.594013727095443755d-11 0.682121026329696178d-11 0.102673425317334477d-10 0.172946101884008385d-10
 0.174651404449832626d-10 0.180904180524521507d-10 0.184741111297626048d-10
 0.457234250461624470d-11 0.535749222763115540d-11 0.61533000916824671d-11 0.917310671866289340d-11 0.153472230924181640d-10
 0.162145852300454862d-10 0.161293201017542742d-10 0.165130131790647283d-10
 0.864011694420717641d-13 0.357049459442926320d-13 0.923792292661929002d-13 0.183903389602935539d-12 0.103847486165875580d-12
 0.183405374221123907d-12 0.118908355384306219d-12 0.936455774036559774d-13
 0.462918592347705271d-11 0.544275735592236742d-11 0.663646915199933574d-11 0.996180915535660461d-11 0.162714286489062943d-10
 0.186162196769146249d-10 0.171098690771032125d-10 0.149924517245381139d-10
 0.332534000335726807d-11 0.391864318771695253d-11 0.448352466264623217d-11 0.630961949354968965d-11 0.113544729174464010d-10
 0.103881347968126647d-10 0.129602995002642274d-10 0.125055521493777633d-10
 0.167510449955443619d-11 0.191313631603406970d-11 0.200011385893769329d-11 0.300204305858642329d-11 0.525091081726714037d-11
 0.402450517581108026d-11 0.436273239756701514d-11 0.794386778579792008d-11

Si on observe la matrice des différences on trouve que la précision obtenue varie de coefficient en coefficient entre treize et quinze chiffres.

Cela montre que le calcul d'un polynôme matriciel est très difficile même par une méthode théoriquement stable.

On présente maintenant un deuxième exemple :

$$A = X J X^{-S} \text{ où } J =$$

$$\begin{bmatrix} -5 & 1 & & & & \\ & -5 & 1 & & & \\ & & -5 & 2 & & \\ & & & 2 & & \\ & & & & -50 & 1 \\ & & & & & -50 & 1 \\ & & & & & & -50 \end{bmatrix}$$

La matrice A est donc :

nat. a 34.0625000000000000 179.003940696649030	49.5119047619047619 -159.038393600706109	60.5977182539602540 -143.667557269119769	100.697916666666667	-160.345701648715042
34.7172619047619048 -150.371518920068027	30.0937500000000000 -141.114459325396825	54.8392857142857143 -127.746144480519481	96.0972222222222222	-142.374200837742594
31.2429202741702742 -141.519761550453515	30.7658279220779221 -126.376613640463072	43.4375000000000000 -114.599203843995511	86.1300505050505051	-127.474109540701803
20.4015151515151515 -131.704065856982524	35.2290764790764791 -117.944958695905666	44.0214646464646465 -107.133975031702304	80.0454545454545455	-119.703556612038755
-5.2500000000000000 12.9340277777777778	-6.2500000000000000 11.5034722222222222	-9.5000000000000000 10.3598484848484848	6.0000000000000000	16.7767857142857143
26.5000000000000000 -153.522321428571429	33.7500000000000000 -91.8125000000000000	45.0000000000000000 -84.1351010101010101	77.0000000000000000	-117.093253968253968
22.0714285714285714 -77.0153061224409796	27.0000000000000000 -110.965097402597403	33.7500000000000000 -61.4569805194805195	51.2500000000000000	-87.2445436507936508
19.2857142857142857 -62.8836451247165533	22.9285714285714286 -56.2609393939393939	27.5000000000000000 -100.928571428571429	39.0000000000000000	-71.3031462585034014

Après avoir appliqué le procédé d'"équilibre" de A, on obtient A' telle que $\|A'\|_1 \approx 666$.

Le paramètre α choisi est 26. On a pris 50 termes de la série.

0.786236520400136537d-01	0.349450795723467150d-06
0.770965245696661581d-01	0.141422190233966548d-06
0.726931501500393337d-01	0.557277852375366271d-07
0.659129630081216450d-01	0.213931143377338123d-07
0.574024663709343384d-01	0.800468402259196885d-08
0.482260502761418484d-01	0.292076659329080729d-08
0.389339855034951650d-01	0.103977906936004377d-08
0.302565185052979256d-01	0.361310422558391848d-09
0.226420140006424366d-01	0.122606458250279049d-09
0.163229714279795030d-01	0.406473779038137816d-10
0.113414953197335499d-01	0.131712100477042830d-10
0.759874425895369537d-02	0.417325777170961344d-11
0.491178663908042299d-02	0.129347630976153699d-11
0.306478551518715106d-02	0.392326786252812996d-12
0.184700312389327193d-02	0.11649603100309007d-12
0.107570522791747359d-02	0.338774600894345140d-13
0.605804783988494704d-03	0.965173379795838532d-14
0.330099339931633954d-03	0.269493551141511532d-14
0.174136416385588763d-03	0.737716337123773121d-15
0.889873787823572049d-04	0.198049447303883213d-15
0.440779397036020780d-04	0.521605579949466157d-16
0.211751638536155452d-04	0.134813190140721110d-16
0.907190570630312108d-05	0.342040463637821448d-17
0.446886175371795564d-05	0.852132664367934431d-18
0.196545006018673801d-05	
0.840323781680900648d-06	

L'approximation de l'exponentielle de A, calculé par cette méthode nous donne :

-4.68061332485486535 4.41673968682001355	-6.12637705976686805 3.77939582701438479	-9.19528415478692695 3.29301808033632453	15.613779256689203	11.4401055808884339
-3.94897106782325308 3.57647240628174265	-5.24980572318095727 3.04910917144106352	-7.87722094328295028 2.64801094463442510	13.8031672959190500	9.57340448159273418
-3.45521857755737271 2.98547270364674787	-4.59918716253414468 2.53705416000044384	-6.89130549962554528 2.19695805011967127	12.3710711959369114	8.21689117017788934
-3.07120995612645581 -1.14432969280470570	-4.08795635276457844 -1.19766738999812784	-6.13128820154691950 -1.21225741569068872	18.5985900671947442	3.08384670821764116
-5.53673861394666785 14.7123884784087954	-7.377264469168224297 13.0910482933726266	-11.0642125507735931 11.7937857655581761	0.104973963162868110d-14	24.1876125676943928
0.404276819945289007d-02 -5.55803868152068229	0.909622844876712178d-02 -5.05247938077347567	0.138127913481273781d-01 -4.63123269991094530	11.0835841483959666	-6.17604602323582731
0.336897349954271566d-02 -3.70755608389113211	0.741174169899390194d-02 -3.37027546346399328	0.10780715198536681d-01 -3.08925122243836525	7.38905609893064254	-4.11987069220151700
0.288769157103668541d-02 -2.78176888402928691	0.625666507057936000d-02 -2.52870492337608386	0.885558748451238865d-02 -2.31783790358455053	5.54179207419798211	-3.09118357285377022

La matrice de différences entre le calcul de l'exponentielle de la matrice A et le résultat exact est la suivante :

mat diff.

0.592147858524683102d-14	0.754171031180916884d-14	0.110553927124001916d-13	0.130208344106819141d-13	0.152187290547445266d-13
0.808728084500387467d-14	0.659758706000879158d-14	0.850925233053523300d-14		
0.508187242287405638d-14	0.645664077758567601d-14	0.946031447623951749d-14	0.117596904436467753d-13	0.127571564423334394d-13
0.671251249029225505d-14	0.549907341884647849d-14	0.717698470098504515d-14		
0.445650460978441743d-14	0.566473951000226357d-14	0.833014213164062767d-14	0.104066061323848658d-13	0.110640663297888756d-13
0.578963960107259368d-14	0.466727351211559949d-14	0.623329513005366209d-14		
0.399333344169860993d-14	0.506279046463831151d-14	0.739512617808912064d-14	0.172813152676009523d-13	0.561790197695088978d-14
0.129301951090621259d-14	0.655725473919233082d-15	0.238654582207509236d-14		
0.566127006385030995d-14	0.761543605953018314d-14	0.113589693206941329d-13	0.104887226989069277d-14	0.250112430766336047d-13
0.154442431066215136d-13	0.135984973201821908d-13	0.123113325090073999d-13		
0.160983609120068580d-14	0.174124224153887619d-14	0.217065406447891629d-14	0.863718818688852252d-14	0.12177588013571858d-14
0.983580210078849623d-15	0.13696209906972399d-14	0.267841304690819015d-14		
0.178757833188547544d-14	0.111827830795354494d-15	0.792348500179562709d-16	0.761456869780019474d-14	0.465079363909381982d-14
0.405057931646564457d-14	0.372271657944622602d-14	0.370059885512752373d-14		
0.5666481054181841d-16	0.226920126569427061d-17	0.605052574882691818d-16	0.550774703622636252d-14	0.333197011648245223d-14
0.280938466934443909d-14	0.260070417135822004d-14	0.236963226818431849d-14		

On trouve donc une erreur de l'ordre de 1.0D-13.

6. Tables de coefficients

On a vu que, théoriquement, pour obtenir une précision de 18 chiffres significatifs, il faut sommer un nombre de termes de la série de Tchébicheff qui est croissant avec α .

On va donner maintenant quelques exemples de coefficients pour $\alpha = 1, 2, 3, 4, 8, 10, 13, 16, 20, 32$.

Pour $\alpha = 1$, on trouve qu'il faut une somme partielle de 18 termes.

```
c( 1)= .465759607593640293
c( 2)= .207910415349708384
c( 3)= 0.499387768942235229d-01
c( 4)= 0.815530777281429121d-02
c( 5)= 0.100693025733777554d-02
c( 6)= 0.998657141120868750d-04
c( 7)= 0.827311621690678921d-05
c( 8)= 0.588319509205404388d-06
c( 9)= 0.366430880311277712d-07
c(10)= 0.203010070736004725d-08
c(11)= 0.101275298646920627d-09
c(12)= 0.459473442163470828d-11
c(13)= 0.191141370957044973d-12
c(14)= 0.734151866562892383d-14
c(15)= 0.261885650692953453d-15
c(16)= 0.872044622622713341d-17
c(17)= 0.272263906139450915d-18
c(18)= 0.800122976470411648d-20
```

Pour $\alpha = 2$, il nous faut 22 termes.

```
c( 1)= .308234094014060819
c( 2)= .215077939523507167
c( 3)= 0.931561544905536504d-01
c( 4)= 0.287656305423998661d-01
c( 5)= 0.685926286335405183d-02
c( 6)= 0.132057908898365876d-02
c( 7)= 0.216367418435758011d-03
c( 8)= 0.303745783691106926d-04
c( 9)= 0.374536985198316291d-05
c(10)= 0.411619553245389306d-06
c(11)= 0.407938727746591524d-07
c(12)= 0.368082549879778109d-08
c(13)= 0.304792287883560462d-09
c(14)= 0.233180441950555343d-10
c(15)= 0.165771334783851685d-11
c(16)= 0.110057325316298293d-12
c(17)= 0.685346809404245398d-14
c(18)= 0.401835811619029582d-15
c(19)= 0.222592965189510777d-16
c(20)= 0.116847427791018372d-17
c(21)= 0.582852386575870742d-19
c(22)= 0.276950475844223089d-20
```

Pour $\alpha = 3$, il nous faut 25 termes.

c(1)= .242613344069356059
c(2)= .196513240813787943
c(3)= .111604516860164099
c(4)= 0.477072183335691452d-01
c(5)= 0.161900801930258091d-01
c(6)= 0.453367115216698788d-02
c(7)= 0.107784301913584950d-02
c(8)= 0.222299075623589874d-03
c(9)= 0.404473328924300946d-04
c(10)= 0.657996686396270327d-05
c(11)= 0.967531708653875032d-06
c(12)= 0.129755472936869736d-06
c(13)= 0.159915737834969682d-07
c(14)= 0.182288266889399058d-08
c(15)= 0.193257319749049891d-09
c(16)= 0.191476845695249301d-10
c(17)= 0.178047405380059054d-11
c(18)= 0.155961328985297621d-12
c(19)= 0.129123253005508385d-13
c(20)= 0.101342537868755935d-14
c(21)= 0.756038371750867245d-16
c(22)= 0.537421635306969350d-17
c(23)= 0.364808232111015491d-18
c(24)= 0.236956154414663063d-19
c(25)= 0.147546200853212798d-20

Pour $\alpha = 4$, il nous faut 27 termes.

c(1)= .206500707339409789
c(2)= .178318029980143716
c(3)= .117341692749337930
c(4)= 0.609763376308057060d-01
c(5)= 0.258771859031292508d-01
c(6)= 0.922196582454728437d-02
c(7)= 0.282227134176103982d-02
c(8)= 0.755151799264164911d-03
c(9)= 0.179240044336462624d-03
c(10)= 0.381916219183144167d-04
c(11)= 0.737774570404774823d-05
c(12)= 0.130289339807567553d-05
c(13)= 0.211832014631532792d-06
c(14)= 0.319013102864787803d-07
c(15)= 0.447349776942071966d-08
c(16)= 0.586825900533742702d-09
c(17)= 0.723035154176493928d-10
c(18)= 0.839777719254755923d-11
c(19)= 0.922409280995139396d-12
c(20)= 0.960936635913046620d-13
c(21)= 0.951947687774510646d-14
c(22)= 0.898894813853597311d-15
c(23)= 0.810013322823346912d-16
c(24)= 0.700015874791570041d-17
c(25)= 0.579506681304044429d-18
c(26)= 0.460785722671752549d-19
c(27)= 0.352452796435374283d-20

Pour $\alpha = 8$, il nous faut 34 termes

$c(1) = .143431781856850292$
 $c(2) = .134142493292698161$
 $c(3) = .109896158533675752$
 $c(4) = 0.791944140258602846d-01$
 $c(5) = 0.505003480142805379d-01$
 $c(6) = 0.286940660115797467d-01$
 $c(7) = 0.146327654998058545d-01$
 $c(8) = 0.674491776187096481d-02$
 $c(9) = 0.282915941653166611d-02$
 $c(10) = 0.108659892880763258d-02$
 $c(11) = 0.384311826714492814d-03$
 $c(12) = 0.125819362021400540d-03$
 $c(13) = 0.383085811556413293d-04$
 $c(14) = 0.108936185544765521d-04$
 $c(15) = 0.290432085359253476d-05$
 $c(16) = 0.728495566902680493d-06$
 $c(17) = 0.17246247707482906d-06$
 $c(18) = 0.386456560727488690d-07$
 $c(19) = 0.821843939830021278d-08$
 $c(20) = 0.166267878039791147d-08$
 $c(21) = 0.320715191410133287d-09$
 $c(22) = 0.591028233472450366d-10$
 $c(23) = 0.104253688370968447d-10$
 $c(24) = 0.176329474321239085d-11$
 $c(25) = 0.286424063625597282d-12$
 $c(26) = 0.447503614588071557d-13$
 $c(27) = 0.673430450805255941d-14$
 $c(28) = 0.977382156465519487d-15$
 $c(29) = 0.136974951910302867d-15$
 $c(30) = 0.185574930933994187d-16$
 $c(31) = 0.243312698315708136d-17$
 $c(32) = 0.309040719721308471d-18$
 $c(33) = 0.380614053169407122d-19$
 $c(34) = 0.454947718578277312d-20$

Pour $\alpha = 10$, il faut 37 termes.

$c(1) = .127833337163428575$	$c(20) = 0.240001171241539566d-07$
$c(2) = .121262681384455489$	$c(21) = 0.567862201452152282d-08$
$c(3) = .103580000886537478$	$c(22) = 0.128562906606786538d-08$
$c(4) = 0.798303610298404981d-01$	$c(23) = 0.278979937036488239d-09$
$c(5) = 0.556825842686331801d-01$	$c(24) = 0.581173431073171304d-10$
$c(6) = 0.352842936149339545d-01$	$c(25) = 0.116401587428294397d-10$
$c(7) = 0.203982906536992258d-01$	$c(26) = 0.224458114173581983d-11$
$c(8) = 0.108063448304948837d-01$	$c(27) = 0.417253034150340629d-12$
$c(9) = 0.526940789100638872d-02$	$c(28) = 0.748653641540485565d-13$
$c(10) = 0.237529220488466180d-02$	$c(29) = 0.129800677184784253d-13$
$c(11) = 0.993881922213997507d-03$	$c(30) = 0.217698493056937476d-14$
$c(12) = 0.387528360456666790d-03$	$c(31) = 0.353555121176051718d-15$
$c(13) = 0.141319529209330572d-03$	$c(32) = 0.556542035130644599d-16$
$c(14) = 0.483614903542734170d-04$	$c(33) = 0.849905939505206752d-17$
$c(15) = 0.155796542882196887d-04$	$c(34) = 0.126022338473122784d-17$
$c(16) = 0.473845834725828882d-05$	$c(35) = 0.181585055825963777d-18$
$c(17) = 0.136427924644482227d-05$	$c(36) = 0.254450051146741592d-19$
$c(18) = 0.372764758634857564d-06$	$c(37) = 0.347002002324466349d-20$
$c(19) = 0.968790670863065577d-07$	

Pour $\alpha = 13$, il faut 41 termes

c(1)= .111760833815854759	c(22)= 0.330737271800432147d-07
c(2)= .107372399246987628	c(23)= 0.906552374109599144d-08
c(3)= 0.952420031624720463d-01	c(24)= 0.239041597633370516d-08
c(4)= 0.780671675046885360d-01	c(25)= 0.607128747915188536d-09
c(5)= 0.592110027756927214d-01	c(26)= 0.148709830185316721d-09
c(6)= 0.416296273350314762d-01	c(27)= 0.351678625870473004d-10
c(7)= 0.271882125179762009d-01	c(28)= 0.803837983712751906d-11
c(8)= 0.165328157799765214d-01	c(29)= 0.177766941744068276d-11
c(9)= 0.938364167800148538d-02	c(30)= 0.380726961998424082d-12
c(10)= 0.498371833012853932d-02	c(31)= 0.790414331400214699d-13
c(11)= 0.248310860551581551d-02	c(32)= 0.159203475060172978d-13
c(12)= 0.116355124471959237d-02	c(33)= 0.311362195747743427d-14
c(13)= 0.514021883682659178d-03	c(34)= 0.591747099974544440d-15
c(14)= 0.214587767151606192d-03	c(35)= 0.109367449914362496d-15
c(15)= 0.848463493794467931d-04	c(36)= 0.196712081148021507d-16
c(16)= 0.318417838727977139d-04	c(37)= 0.344556006542783841d-17
c(17)= 0.113653096729905300d-04	c(38)= 0.588106213971045697d-18
c(18)= 0.386563698543640909d-05	c(39)= 0.978785397465013603d-19
c(19)= 0.125518217261838315d-05	c(40)= 0.158932123761146671d-19
c(20)= 0.389747892031655738d-06	c(41)= 0.251926548981335755d-20
c(21)= 0.115919103602774070d-06	

Pour $\alpha = 16$, il faut 45 termes

c(1)= .100544127361251910	c(24)= 0.326109668181589784d-07
c(2)= 0.973496147564679769d-01	c(25)= 0.990201861235877467d-08
c(3)= 0.883754255166934127d-01	c(26)= 0.290491098108265431d-08
c(4)= 0.752557583772946236d-01	c(27)= 0.824171796475479942d-09
c(5)= 0.601545161252079287d-01	c(28)= 0.226352642537344499d-09
c(6)= 0.451785003146906591d-01	c(29)= 0.602316279119422564d-10
c(7)= 0.319179534285262667d-01	c(30)= 0.155419448455466019d-10
c(8)= 0.212400352432959590d-01	c(31)= 0.389207784683582459d-11
c(9)= 0.133329225906423026d-01	c(32)= 0.946652919912259652d-12
c(10)= 0.790711265265365642d-02	c(33)= 0.223797782175818436d-12
c(11)= 0.443742085640693906d-02	c(34)= 0.514617912089859081d-13
c(12)= 0.236033658214498259d-02	c(35)= 0.115178934387515648d-13
c(13)= 0.119195805595758800d-02	c(36)= 0.251074409429175788d-14
c(14)= 0.572399498208600576d-03	c(37)= 0.533388026225124025d-15
c(15)= 0.261808871368612068d-03	c(38)= 0.110497976278699768d-15
c(16)= 0.114233973313529457d-03	c(39)= 0.223348859361375973d-16
c(17)= 0.476201714057443354d-04	c(40)= 0.440726808204618092d-17
c(18)= 0.189936305020407862d-04	c(41)= 0.849454036162465303d-18
c(19)= 0.725870658890766464d-05	c(42)= 0.159997901233854404d-18
c(20)= 0.266154067699854077d-05	c(43)= 0.294647923389614819d-19
c(21)= 0.937547481036130296d-06	c(44)= 0.530774145430662379d-20
c(22)= 0.317671974408215032d-06	c(45)= 0.935682022063379048d-21
c(23)= 0.103658548214565837d-06	

Pour $\alpha = 20$, il nous faut 50 termes

c(1)= 0.897803118848259137d-01	c(26)= 0.492494652202188720d-07
c(2)= 0.875062221832885605d-01	c(27)= 0.168030644644172756d-07
c(3)= 0.810296896664970582d-01	c(28)= 0.556149761273395554d-08
c(4)= 0.713002842499891493d-01	c(29)= 0.178702091003559568d-08
c(5)= 0.596396043915003138d-01	c(30)= 0.557839064634287639d-09
c(6)= 0.474444424933890241d-01	c(31)= 0.169287622596161533d-09
c(7)= 0.359173831448058020d-01	c(32)= 0.499761968458030418d-10
c(8)= 0.258940126065055431d-01	c(33)= 0.143614123741721038d-10
c(9)= 0.177915743202519220d-01	c(34)= 0.401967724845230980d-11
c(10)= 0.116607531503040057d-01	c(35)= 0.109647745427948149d-11
c(11)= 0.729689648497831693d-02	c(36)= 0.291653903902072753d-12
c(12)= 0.436385666532568877d-02	c(37)= 0.756887906222268509d-13
c(13)= 0.249665415312005931d-02	c(38)= 0.191742576620560907d-13
c(14)= 0.136787168158161760d-02	c(39)= 0.474403727261931563d-14
c(15)= 0.718420967063956435d-03	c(40)= 0.114691602610269132d-14
c(16)= 0.362082327692078600d-03	c(41)= 0.271064770818819495d-15
c(17)= 0.175297475525838537d-03	c(42)= 0.626569428274133409d-16
c(18)= 0.816063660507369420d-04	c(43)= 0.141713052264247975d-16
c(19)= 0.365666518795857360d-04	c(44)= 0.313746087642919154d-17
c(20)= 0.157863934674826174d-04	c(45)= 0.680223457779273901d-18
c(21)= 0.657250429136876312d-05	c(46)= 0.144477662200386383d-18
c(22)= 0.264138488474509118d-05	c(47)= 0.300739778775351766d-19
c(23)= 0.102559603340407165d-05	c(48)= 0.613736396372457125d-20
c(24)= 0.385073611256133564d-06	c(49)= 0.122836724802969176d-20
c(25)= 0.139926727514964455d-06	c(50)= 0.241201173182050813d-21

Pour $\alpha = 32$, il nous faut 60 termes.

c(1)= 0.708041893112455350d-01	c(31)= 0.108132743617131587d-06
c(2)= 0.696889465450689443d-01	c(32)= 0.459543503282299531d-07
c(3)= 0.664486301521787259d-01	c(33)= 0.190961898561860528d-07
c(4)= 0.613828677760466035d-01	c(34)= 0.776197061585784743d-08
c(5)= 0.549393424441699877d-01	c(35)= 0.308712546097924251d-08
c(6)= 0.476480321650041065d-01	c(36)= 0.120182901127695709d-08
c(7)= 0.400493323926062044d-01	c(37)= 0.458124498010898876d-09
c(8)= 0.326295325177767798d-01	c(38)= 0.171048888952434618d-09
c(9)= 0.257739119160788632d-01	c(39)= 0.625739431083938230d-10
c(10)= 0.197425765597373482d-01	c(40)= 0.224357740699992878d-10
c(11)= 0.146687126012266048d-01	c(41)= 0.788674381277055894d-11
c(12)= 0.105746311839707202d-01	c(42)= 0.271891453807289046d-11
c(13)= 0.739865366224673469d-02	c(43)= 0.919525308958777146d-12
c(14)= 0.502564093728566915d-02	c(44)= 0.305160602056100448d-12
c(15)= 0.331532040070212850d-02	c(45)= 0.994061909330071914d-13
c(16)= 0.212473558667130671d-02	c(46)= 0.317935769903306717d-13
c(17)= 0.132338078819777846d-02	c(47)= 0.998675564770217710d-14
c(18)= 0.801354798473528252d-03	c(48)= 0.308165450318691256d-14
c(19)= 0.471941314819654688d-03	c(49)= 0.934395544590621450d-15
c(20)= 0.270420819301416727d-03	c(50)= 0.278467869415048211d-15
c(21)= 0.150816591899222325d-03	c(51)= 0.815876945070363027d-16
c(22)= 0.819000794273888209d-04	c(52)= 0.235063240805597651d-16
c(23)= 0.433227376507744973d-04	c(53)= 0.666128650025205156d-17
c(24)= 0.223313151575738871d-04	c(54)= 0.185714295474059747d-17
c(25)= 0.112214721117620345d-04	c(55)= 0.509500462673822444d-18
c(26)= 0.549910698993083541d-05	c(56)= 0.137578893216446720d-18
c(27)= 0.262911743999510414d-05	c(57)= 0.365730172422868432d-19
c(28)= 0.122679114993879119d-05	c(58)= 0.957333286844276919d-20
c(29)= 0.558907374473394005d-06	c(59)= 0.246801889845947792d-20
c(30)= 0.248703244610351679d-06	c(60)= 0.626764361527161710d-21

CHAPITRE 6

UNE MÉTHODE POUR CALCULER LE NOMBRE DE CHIFFRES SIGNIFICATIFS EXACTS OBTENUS PAR UN ALGORITHME QUI CALCULE L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE

1. INTRODUCTION

On peut effectuer une détermination approchée du nombre de chiffres significatifs obtenus lorsqu'on calcule l'exponentielle d'une matrice par des méthodes dérivées du calcul d'erreur absolue fait dans le chapitre 3, mais les résultats obtenus sont souvent très pessimistes.

On va maintenant présenter une méthode utilisée par Vignes [12] pour déterminer la dégénérescence d'une matrice A , pour calculer le nombre de chiffres significatifs du résultat quand on calcule l'exponentielle d'une matrice par la méthode de Padé.

2. NOTATION

On note $\bar{A}$ la représentation en machine de la matrice A . Si $\bar{a}_{ij}$ est un coefficient de A , alors a_{ij} sera la notation de son représentant en machine, c'est-à-dire un coefficient de $\bar{A}$.

En plus on note $e^{\bar{A}}$ la matrice e^A calculé par la méthode de Padé et :

$$1) \quad E = (e_{ij}) = e^{\bar{A}} - e^A$$

3. ERREUR DE CALCUL

Les opérations d'addition, soustraction, multiplication et division nécessaires à l'exécution d'un algorithme quelconque sont effectuées sur l'ordinateur

avec une précision limitée. (Dans Vignes[12] et Wilkinson[11] on trouve une étude du type d'erreur faite dans ces opérations machine).

4. ERREUR SUR LES COEFFICIENTS

Dans un ordinateur on ne peut pas traiter une matrice quelconque A, sinon une image $\bar{A}$ obtenue en faisant correspondre à chaque coefficient a_{ij} de A un coefficient $\bar{a}_{ij}$ de $\bar{A}$ par un opérateur d'affectation.

En effet, tout nombre réel peut être écrit de la façon suivante :

$$2) \quad a = \pm m \times 2^e; \quad m \in [1/2, 1[$$

où m est appelée la matrice et e l'exposant, un nombre entier.

On remarque que m peut être un nombre d'un numéro illimité de chiffres.

En machine, on ne peut pas représenter la matrice avec tous ses chiffres, donc on prend un nombre limité de chiffres.

On garde donc un nombre n de chiffres de m, en supposant qu'on ait choisi sur n chiffres tout simplement en prenant les n premiers chiffres de m. Cela est une affectation par troncature, cas très fréquent (Pichat [14]).

Donc a est représenté en machine par $\bar{a} = M \times 2^e$ où M est la mantisse tronquée aux n premiers chiffres.

Alors

$$3) \quad -2^{-E-n} \leq \bar{a} - a \leq 0$$

Donc, l'erreur relative α de troncature est donnée par :

$$4) \quad \alpha = \frac{\bar{a} - a}{a} \quad \text{où} \quad \frac{-2^{-n}}{M} \leq \alpha < 0$$

C'est-à-dire, on peut écrire $\alpha = \frac{r}{M}$ où $M \in [1/2, 1[$ et $r \in [-2^{-n}, 0]$.

On trouve alors que l'erreur possible quand on affecte à un nombre a un nombre $\bar{a}$ dans un ordinateur par troncature, est une fraction r/n où :

$$5) \quad \begin{aligned} &1/2 \leq M < 1 \\ &-2^{-n} \leq r \leq 0 \end{aligned}$$

Donc, pour considérer le problème de coefficients on peut étudier trois cas :

- Premier cas :

Tous les a_{ij} sont connus exactement et sont représentables en machine exactement.

- Deuxième cas :

Tous les a_{ij} sont connus exactement mais ils ne sont pas représentables en machine exactement, donc $\bar{A}$ est une approximation de A , l'erreur provenant de l'opérateur d'affectation.

- Troisième cas :

Tous les a_{ij} sont connus avec une certaine erreur; c'est le cas quand les a_{ij} résultent d'un calcul préliminaire.

5. ESTIMATION STATISTIQUE DE L'ERREUR

On va maintenant faire une estimation moyenne $\bar{e}_{ij}$ de e_{ij} par voie statistique à partir de populations créées de façon différente, suivant l'origine de l'erreur.

Les éléments de ces populations sont les différentes valeurs numériques des coefficients de la matrice e^A quand on la calcule par une méthode de Padé.

Dans une première analyse on peut considérer que les a_{ij} correspondent au premier cas cité dans le paragraphe précédent, c'est-à-dire on considère seulement l'erreur due au calcul.

Cela donne une méthode pour obtenir la population de différentes valeurs numériques de e^A appelée par Vignes [12], "méthode de permutation".

Si on considère ensuite que les a_{ij} correspondent au deuxième ou troisième cas alors on prend en compte les erreurs d'affectation et celles du calcul.

Pour obtenir les différents éléments de la population de valeur numérique de e^A on utilise la méthode dite de "permutation-perturbation".

6. METHODE DE PERMUTATION

Cette méthode s'applique lorsque tous les coefficients a_{ij} sont égaux aux $\bar{a}_{ij}$.

Lors du calcul de e^A sur ordinateur, l'erreur e_{ij} est due à l'arithmétique en précision limitée, donc le résultat obtenu dépend de l'ordre dans lequel les sont effectuées les opérations.

Alors, pour obtenir un échantillon de résultats $e^{\bar{A}}$, on peut permuter les lignes et les colonnes de $\bar{A}$.

Cela nous donne un échantillon de $e^{\bar{A}}$ qui correspond aux $N!$ permutations de lignes et de colonnes de A . ($A \in M_{N \times N}(R)$).

En plus, un changement simultané d'une ligne et la colonne correspondante est une transformation orthogonale et :

$$6) \quad e^{P A P^{-1}} = P e^A P^{-1}$$

alors, une telle manipulation ne change pas théoriquement les valeurs de e^A .

7. METHODE DE PERMUTATION-PERTURBATION

Cette méthode s'applique lorsque tous les a_{ij} sont connus exactement mais ne tombent pas juste en machine.

Alors

$$7) \quad \bar{a}_{ij} = a_{ij} (1 + \alpha_{ij})$$

où les α_{ij} proviennent de l'erreur d'affectation et appartiennent à la population décrite dans le paragraphe 4.

Donc, a_{ij} est une approche au plus près par défaut de a_{ij} ; on le notera a_{ij}^- . Il existe alors l'approche au plus près par excès qu'on notera a_{ij}^+ . Il est clair que a_{ij}^- et a_{ij}^+ sont représentables exactement en machine et $a_{ij} \in [a_{ij}^-, a_{ij}^+]$.

Donc, on aura 2^{N^2} représentations possibles de la matrice A qu'on peut simuler en machine.

Si, en plus, on considère les permutations pour étudier les erreurs de calcul, on obtient : $N! 2^{N^2}$ matrices différentes pour lesquelles e^A est théoriquement la même.

8. ÉVALUATION DE LA MOYENNE $\hat{e}_{ij}$ DE L'ERREUR e_{ij}

Une fois calculé un échantillon de matrices représentantes de A sur la machine par la méthode de "permutation-perturbation", on a un ensemble $\{\bar{A}_1, \dots, \bar{A}_r\}$ et donc un échantillon de résultats possibles $\{e^{\bar{A}_1}, \dots, e^{\bar{A}_r}\}$.

Nous allons donner une estimation $\hat{e}_{ij}$ de l'erreur absolue e_{ij} définie par :

$$8) \quad e_{ij} = e^{\bar{A}}_{ij} - e^A_{ij}$$

Suivant Vignes [12] on fait l'hypothèse suivante :

Lors du calcul de $e^{\bar{A}_1}$ sur l'ordinateur, les erreurs de calcul et d'affectation ont joué indifféremment dans un sens comme dans l'autre.

Donc, on peut considérer e^A comme un élément de l'échantillon de résultats.

Soit maintenant :

$$9) \quad R_{ij} = \frac{1}{r} \sum_{k=1}^r e^{\bar{A}_k}_{ij}$$

et

$$10) \quad \delta^2_{ij} = \frac{1}{r} \sum_{k=1}^r (e^{\bar{A}_k}_{ij} - R_{ij})^2$$

Alors on trouve :

$$e^2_{ij} = (e^{\bar{A}_1}_{ij} - e^A_{ij})^2 =$$

$$= (e^{\bar{A}_1}_{ij} - R_{ij} + R_{ij} - e^A_{ij})^2 =$$

$$11) \quad = (e^{\bar{A}_1}_{ij} - R_{ij})^2 + 2(R_{ij} - e^A_{ij})(e^{\bar{A}_1}_{ij} - R_{ij}) + (R_{ij} - e^A_{ij})^2$$

Donc, si on calcule la moyenne de e^2_{ij} on a que :

- La moyenne de $(e_{ij}^{\bar{A}_1} - R_{ij})^2$ est égale à $(e_{ij}^{A_1} - R_{ij})^2$, car il n'y a rien d'aléatoire dans cette quantité.
- La moyenne de $R_{ij} - e_{ij}^A$ est nulle d'après l'hypothèse faite par Vignes [12].
- La moyenne de $(R_{ij} - e_{ij}^A)^2$ est le carré de l'écart d'un élément quelconque de la population à sa valeur moyenne, donc il a par valeur moyenne la variance que on note δ_{ij}^2 .

Donc :

$$12) \quad \text{Moy}(e_{ij}^2) = (e_{ij}^{\bar{A}_1} - R_{ij})^2 + \delta_{ij}^2$$

et

$$13) \quad \hat{e}_{ij} = \sqrt{\text{Moy}(e_{ij}^2)} = \sqrt{(e_{ij}^{\bar{A}_1} - R_{ij})^2 + \delta_{ij}^2}$$

Donc, à cette étape de calcul, on connaît $\hat{e}_{ij}$ et $e_{ij}^{\bar{A}_1}$, alors on peut obtenir le nombre de chiffres significatifs exacts de $e_{ij}^{\bar{A}_1}$.

9. CALCUL DU NOMBRE DE CHIFFRES SIGNIFICATIFS EXACTS DU RÉSULTAT

Si on note c_{ij} le nombre de chiffres significatifs exacts de chaque coefficient de $e_{ij}^{\bar{A}_1}$, on trouve que :

$$14) \quad 10^{-C_{ij}} = \frac{\hat{e}_{ij}}{|e_{ij}^{\bar{A}_1}|}$$

Alors :

$$15) \quad C_{ij} = \log_{10} \left| \frac{e_{ij}^{\bar{A}_1}}{\hat{e}_{ij}} \right|$$

Cela donne un moyen d'assurer à une matrice $e^{\bar{A}}$, calculée par une méthode de Padé, une matrice d'estimation de chiffres significatifs exacts du résultat.

Cette méthode, proposée par Vignes [12], présente certains inconvénients :

- Le premier est le fait qu'on ne peut pas obtenir matériellement tous les résultats possibles de e^A , donc il faut se fixer un nombre assez restreint.

On utilise trois résultats provenant de A_1, A_2, A_3 obtenus par la méthode de permutation-perturbation.

Cette quantité très restreinte d'éléments de l'échantillon dans la pratique s'avère suffisante pour déterminer le nombre de chiffres significatifs du résultat.

- Le deuxième inconvénient est qu'un procédé semblable multiplie le coût de notre algorithme par trois.

10. EXEMPLES DE L'APPLICATION PRATIQUE DE LA MÉTHODE DE VIGNES

Le premier exemple qu'on va présenter a été calculé par la méthode de bloc diagonalization suivie de la méthode de Ward appliquée au blocs.

Soit un premier exemple :

MAT A=

-131.000000000000	19.330000000000	18.000000000000
-390.000000000000	56.000000000000	54.000000000000
-387.000000000000	57.000000000000	52.000000000000

NORME UN DE A
0.90000000 03
BLOCK STRUCTURE
1 1 1

CARACT. DE VALEUR PROPRE
0 0 0

PRT. REEL	PRT. IMAG
-12.333	0.0
6.6667	0.0
5.6667	0.0

L'exponentielle de A calculée par notre méthode, nous donne :

```

EXPAL=
-1.509644158795744    0.3678754391102199    0.1353352811754118
-5.632570799901266    1.471517758502041    0.4060058435261979
-4.914928326056578    1.103630317330643    0.5413411267628340

```

La matrice de précision obtenue avec un échantillon de trois "permutation-perturbation" de A est :

$$\text{Précision de } e^{\bar{A}} = \begin{bmatrix} 12 & 12 & 12 \\ 12 & 13 & 12 \\ 12 & 12 & 12 \end{bmatrix}$$

Un deuxième exemple où on a aussi utilisé la méthode de bloc diagonalization suivie de la méthode de Ward appliquée aux blocs.

```

MAT A=
1520.300000000000    31.13555555555555    -503.02355555555597    -75958.77199999998
-69.45555555555555    -241.65555555555555    4410.075555555557    3426.468000000000
-3.000000000000000    -11.40000000000000    220.2400000000000    147.7200000000000
31.00000000000000    0.600000000000000    -5.55555555555555    -1548.880000000000

```

```

NORME LN DE A
0.810818400 05
BLOCK STRUCTURE
4 -3 -2 -1

```

```

CARACT. DE VALEUR PROPRE
0 0 0 0

```

```

PRT. REEL PRT. IMAG
-30.000 0.0
-20.000 0.0
-1.0000 0.0
1.0000 0.0

```

La matrice exponentielle de A exacte (obtenue par la même méthode que A) est la suivante :

135.9140514230095	35.2111085756666	-736.7766818043449	-6652.734858012389
-5436563787303004	-4.43049641120267	53142515067058012	25.75306289098275
-61831801386266080-09-	0.2207276634661732	4.457353701135576	-44145501777333940-01
2.718281828458952	0.7051207101862000	-14660621852068463	-133.0547854512512

La matrice exponentielle de A calculée par la méthode de bloc diagonalization suivie de la méthode de Ward sur le bloc est :

135.9140514174258	35.21110857566154	-736.7766818387425	-6652.734857740312
-5436563786820781	-4.43049641073812	53142515064427357	25.75306288825369
-61664678458305770-09-	0.2207276634611822	4.457353701026476	-44145501858211500-01
2.718281828347380	0.7051207100303664	-14660621852537400	-133.0547854458147

La matrice de Précision obtenue avec un échantillon de trois résultats possibles est :

$$\text{Précision de } e^{\bar{A}_1} = \begin{bmatrix} 9 & 9 & 9 & 9 \\ 9 & 10 & 10 & 9 \\ 1 & 10 & 10 & 7 \\ 9 & 9 & 9 & 9 \end{bmatrix}$$

On remarque que la matrice de précision, les chiffres significatifs, nous donne une idée assez certaine sur la précision avec laquelle on a calculé l'exponentielle de A.

On a calculé aussi la matrice de précision à l'aide d'un échantillon de quatre et cinq résultats et l'on constate qu'elle est exactement la même.

On présente un troisième exemple ou l'on a calculé l'exponentielle de A par la méthode de Ward.

MAT A=

1520.300000000000	31.1399999999999	-503.023999999997	-75958.77109999998
-69.4977777777777	-241.659999999999	4670.07599999997	3426.46800000000
-3.00000000000000	-11.4000000000000	220.240000000000	147.720000000000
31.0000000000000	0.60000000000000	-9.5599999999999	-1548.88000000000

La matrice exponentielle de A est égale à :

135.9140914230095	35.2781095756006	-730.776681804349	-6652.734850012389
-5.5436563787383004	-4.430498401202067	93.42315067098012	25.75306289098279
-6.61831801306266080-07-	2207276634661732	4.657153701135576	-44145501777333940-01
2.718281828453952	0.7051207161362308	-14.60621892868463	-133.0547854512512

La matrice exponentielle de A calculée par la méthode de Ward est la suivante :

135.9140914316447	35.27810357645024	-730.7766819198184	-6652.734850434252
-5.5436563787959334	-4.430498401000037	93.42915066670602	25.75306289383920
-6.61849349110715570-09-	2207276634556011	4.657153700911300	-44145501717792400-01
2.718281828681203	0.7051207162019811	-14.60621892899224	-133.0547854596665

La matrice de précision calculée avec un échantillon de trois résultats est la suivante :

$$\text{Précision de } e^{\bar{A}_1} = \begin{bmatrix} 10 & 10 & 10 & 10 \\ 10 & 11 & 11 & 10 \\ 2 & 11 & 11 & 8 \\ 10 & 10 & 10 & 10 \end{bmatrix}$$

On a aussi dans cet exemple calculé les chiffres significatifs du résultat obtenu avec un échantillon de quatre et cinq résultats possibles et la matrice de précision est la même.

On remarque que cet exemple correspond à la même matrice A que l'exemple précédent, mais calculé par une autre méthode. On constate que la méthode de bloc diagonalisation n'a pas permis de calculer l'exponentielle de A avec plus de précision que la méthode de Ward.

11. CONCLUSION

Si on compare, dans les trois exemples qu'on vient de présenter, la matrice exponentielle de A exacte à l'exponentielle de A calculée par la méthode de Padé, on remarque que la méthode de Vignes nous donne le nombre de chiffres significatifs exactes, voire un de moins.

Dans les deux derniers exemples, on observe que certains coefficients de la matrice exponentielle calculée par la méthode de Padé ont un ou deux chiffres significatifs exactes, cela correspondant à un coefficient d'ordre 10^{-9} , quand tous les autres sont de l'ordre de l'unité ou plus grands.

La méthode de Vignes nous donne un moyen sûr pour calculer le nombre de chiffres significatifs du résultat obtenu.

Seul inconvénient, il multiplie par trois le coût de calcul.

Il existe d'autres moyens pour calculer la précision du résultat obtenu, ceux développés par Ward [33] pour sa méthode, à partir de l'estimation de l'erreur absolue donnée au chapitre 3. Les résultats obtenus sont très pessimistes.

Si on utilise une évaluation statistique de l'estimation de l'erreur absolue calculée au chapitre 3 on obtient des résultats meilleurs mais encore très pessimistes.

CONCLUSION

On résume dans ce paragraphe quelques unes des conclusions tirées tout au long de notre travail.

Dans le premier chapitre on remarque que l'évolution de la distance $||e^{At} - e^{(A+B)t}||$, lorsque t tends vers l'infini, dépend à même titre de A que de $A+B$.

On a démontré aussi que étant données A et D , deux matrices $N \times N$, alors :

$$\phi(t) = \frac{||e^{At} - e^{Dt}||}{\text{Max}\{||e^{At}||, ||e^{Dt}||\}} \leq ||A-D|| p(t) \quad \text{où } p(t)$$

est un polynôme en t de degré déterminé par les structures des matrices de A et D .

Le polynôme $p(t)$ est réduit à une constante si les valeurs propres de A et D sont simples et s'il n'y a pas de valeurs propres communes.

Dans le deuxième chapitre, on remarque que le calcul de l'exponentielle d'une matrice à l'aide des approximants de Padé est possible seulement pour des matrices avec un rayon spectral petit.

On observe aussi au troisième chapitre que la méthode par "transformation du spectre" améliore sensiblement la méthode de Ward.

L'algorithme par "transformation du spectre" garde toutes les bonnes propriétés de la méthode de Ward si $K(X)$ est petit.

L'erreur commise quand on calcule l'exponentielle d'une matrice par la méthode par "transformation du spectre" ou la méthode de Ward dépend fortement du nombre des produits matriciels faits à la dernière étape de l'algorithme.

Donc, du point de vue pratique, on signale que soigner le calcul du polynôme matriciel est très important.

On a utilisé la méthode de Clenshaw au lieu de celle d'Horner, car elle est plus stable du point de vue calcul.

Il est aussi important de donner un procédé pour calculer les produits matriciels qui dépendent de la forme de la matrice.

Dans le quatrième chapitre, on expose une méthode plus élaborée, que l'on considère la plus complète et performante du point de vue précision du résultat obtenu.

On remarque que le choix du paramètre R doit être fait de façon à ce que le calcul de l'exponentielle des blocs par la méthode de "transformation du spectre" soit fait avec précision, c'est-à-dire tel que $\text{Max}(\text{Re}(\lambda_i)) - \text{min}(\text{Re}(\lambda_i)) \leq 2$, pour λ_i valeurs propres d'un même bloc.

Dans le chapitre cinq on utilise le développement en série de polynômes de Tchébicheff pour calculer l'exponentielle d'une matrice. Cette méthode semble être intéressante dans le cas où la quantité $\text{Max}(\text{Re}(\lambda_i)) - \text{min}(\text{Re}(\lambda_i))$, λ_i valeur propre de A , est petite (moins de 32), car, sinon il faut calculer la valeur d'un polynôme matriciel de très haut degré. On remarque aussi que cette méthode a l'avantage de ne pas avoir à résoudre un système linéaire.

Au sixième chapitre, on applique la méthode de Vignes pour estimer l'erreur commise quand on calcule l'exponentielle d'une matrice par une méthode de Padé. On remarque que les résultats obtenus sont satisfaisants, mais le coût de calcul est multiplié par trois.

On pourrait envisager d'autres méthodes, en particulier l'usage des approximations de Padé généralisés, Padé Tchébicheff, ou l'approximation par fractions rationnelles au sens de Tchébicheff. Toutes ces méthodes posent des problèmes au niveau du calcul des coefficients de l'approximant utilisé.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] R. BELLMAN
Introduction to Matrix Analysis.
Mc-Graw-Hill, New York (1969).
- [2] F.R. GANTMACHER
Théorie des matrices. Tome I et II,
Dunod (1966).
- [3] C.C. MAC DUFFEE
The theory of matrices.
Chelsea Publishing Company. New York (1956).
- [4] N. GASTINEL
Analyse numérique linéaire.
Hermann. Paris VI (1966).
- [5] V. SMIRNOV
Cours de Mathématiques Supérieures. Tome III.
Mir. Moscou, U.R.S.S. (1972).
- [6] V. ARNOLD
Equations différentielles ordinaires.
Mir. Moscou, U.R.S.S. (1974).
- [7] Yudell L. LUKE
The special functions and their approximation. Tome I et II,
Academic Press (1969).
- [8] L. FOX et D.F. MAYERS
Computing Methods for scientists and engineers.
Oxford University Press (1968).
- [9] L. FOX et I.B. PARKER
Chebyshev Polynomials in Numerical Analysis.
Oxford Mathematical Handbooks (1968).
- [10] L. FOX
Determination and properties of Chebyshev expansions.
D.C. Handscomb (1965).
- [11] J.H. WILKINSON
Rounding Errors in Algebraic Process.
Her Majesty's Stationery office, London (1963).

- [12] M. LA PORTE et J.VIGNES
Algorithmes numériques. Analyse et mise en oeuvre.
1, arithmétique des ordinateurs, systèmes linéaires. Technip (1974).
- [13] D. PHAM
Techniques du calcul matriciel.
Dunod (1962).
- [14] Michèle PICHAT
Contribution à l'étude des erreurs d'arrondi en arithmétique à virgule flottante.
Thèse soutenue à Grenoble (1976).
- [15] E.E.OSBORNE
On Pre-conditioning of Matrices.
Journal A.C.M. 7 , pages 338-345 (1960).
- [16] B.N.PARLETT et C.REINSCH
Balancing a Matrix for calculation of Eigenvalues and Eigenvectors
Numer. Math. 13, pages 293-304 (1969).
- [17] C.A.BAVELY et G.W.STEWART
An algorithm for computing reducing subspaces by block diagonalization.
Computer science technical report series
University of Maryland, collège Park, Maryland (1976).
- [18] B.T.SMITH, J.M.BOYLE, B.S.GARROW, Y.IKEBE, V.C.KLEMA, C.B.MOLER
Matrix eigensystem Routines- EISPACK Guide.
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.
- [19] R.VARGA
On higher order stable implicit methods for solving parabolic partial differential equations.
J.Math. Phys. 40, pages 220-231 (1961).
- [20] Y.SAAD
Quelques méthodes de calcul d'éléments propres de grands matrices non symétriques.
Séminaire d'analyse numérique n°324 Grenoble (1979).
- [21] HERMITE
Sur la fonction exponentielle.
C.R.A.S. , t. LXXVII, pages 18-24, 74-79, 226-233, 285-293 (1873).
- [22] H. PADÉ
Thèse.
Ann. Éc. N. Sup. 9. (1892).

- [23] TORSTEN STROM
On logarithmic Norms.
S.I.A.M. Journal Numer. Anal. Vol 12 . N°3 , pages 741 à 753 (1975).
- [24] R.B. KIRCHNER
An explicit formula for e^{At} .
American Mathematical Society 74.10. pages 1200 à 1204 (1967).
- [25] E.G. KOGBETLIANTZ
Calcul des fonctions élémentaires.
dans "Méthodes mathématiques pour calculateurs arithmétiques".
Ralston et Wiff.
Dunod, Paris (1965).
- [26] C. UNDERHILL et A.WRAGG
Convergence properties of Padé approximants to $\exp(Z)$ and their derivatives.
J. Inst. Maths. Appl. 11, pages 361 à 367 (1973).
- [27] A. WRAGG et C. DAVIES
Computation of the exponential of a matrix.
I : Theoretical considerations.
J. Inst. Maths. Applics. 11, pages 369 à 375 (1973).
- [28] A. WRAGG et C. DAVIES
Computation of the exponential of a Matrix.
II : Practical Considerations.
J. Inst. Maths. Applics. 15, pages 273 à 278 (1975).
- [29] E.B.SAFF et R.VARGA
On the zeros and poles of Padé approximants to e^Z .III
Numer. Math. 30, pages 241 à 266 (1978).
- [30] M.CROUZEIX et F.RUAMPS
On rational approximations to the exponential.
R.A.I.R.O. Analyse Numérique Vol 11 n°3 , pages 241 à 243 (1977).
- [31] WYAMAN FAIR et YUDELL L. LUKE
Padé Approximations to the Operator exponential.
Numer. Math 14. pages 379 à 382 (1970).
- [32] CHARLES VAN LOAN
The sensitivity of the matrix exponential.
S.I.A.M. Journal Numer. Anal. Vol 14 , n°6 (1977).

[33] R.C.WARD

Numerical Computation of the matrix exponential with accuracy estimate.
S.I.A.M. Journal of Numer. Anal. Vol 14, n° 4 pages 600 à 610 (1977).

[34] C.B.MOLER et CHARLES VAN LOAN

Nineteen Dubious Ways to compute the exponential of a Matrix.
S.I.A.M. Review. Vol 20 , n°4 (1978).

[35] ARIEH ISELES

On the generalized Padé approximation to the exponential function.
S.I.A.M. Journal of Numer. Analysis. Vol 16, n°4, pages 631 à 636
(1979).

[36] D.BUSSONNAIS

Les Approximants de Padé.
Rapport du D.E.A. présenté à l'Univ. S et M de Grenoble (1976).

TABLE DES MATIERES

<u>Introduction</u>	1
<u>Chapitre 1</u>	
<u>FONCTIONS MATRICIELLES. EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE</u>	
1. Fonction de matrice associée à une fonction analytique.....	3
2. Détermination de la fonction d'une matrice par la formule de Cauchy.....	6
3. Forme de Souriau de la résolvante d'une matrice.....	8
4. La fonction exponentielle d'une matrice.....	9
5. Propriétés de l'exponentielle d'une matrice.....	9
6. Norme de l'exponentielle d'une matrice.....	11
7. "Sensibilité" du problème.....	15
<u>Chapitre 2</u>	
<u>APPROXIMANTS DE PADE DE L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE</u>	
1. Rappel sur les approximants de Padé. Définition.....	25
2. Approximants de Padé de la Fonction exponentielle.....	26
3. Convergence. Une borne d'erreur théorique dans le cas "scalaire".....	28
4. Calcul de l'erreur sur les dérivées.....	30
5. "A-acceptabilité" des approximants de Padé de l'exponentielle...	31
6. Approximants de Padé de l'exponentielle d'une matrice.....	34
7. "A-acceptabilité" dans le cas matriciel.....	37
<u>Chapitre 3</u>	
<u>USAGE PRATIQUE DE LA METHODE DE PADE POUR LE CALCUL DE L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE</u>	
1. Méthode de Ward.....	38
2. Méthode par transformation du spectre.....	43
3. Borne de l'erreur d'arrondi commise quand on calcule l'exponentielle d'une matrice par la méthode de Padé.....	48
4. Exemple.....	55
<u>Chapitre 4</u>	
<u>METHODE POUR CALCULER L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE QUI UTILISE UN ALGORITHME DE BLOC DIAGONALISATION</u>	
1. Introduction.....	72
2. Méthode pour bloc diagonaliser une matrice A.....	73
3. Algorithme pour calculer l'exponentielle d'une matrice qui utilise le programme de Stewart et Bavely.....	75
4. Commentaire sur le choix de R.....	77
5. Exemple de l'application de la méthode de bloc diagonalisation suivie de la méthode par transformation du spectre.....	84

Chapitre 5

DEVELOPPEMENT EN SERIE DE POLYNOMES DE TCHEBICHEFF

1. Introduction.....	93
2. Application au calcul de l'exponentielle.....	94
3. Calcul de $p_n(A)$. Méthode de Clenshaw.....	96
4. Erreur d'arrondi dans la méthode de Clenshaw matricielle.....	97
5. Exemples numériques.....	100
6. Tables de coefficients.....	106

Chapitre 6

UNE METHODE POUR CALCULER LE NOMBRE DE CHIFFRES SIGNIFICATIFS EXACTES OBTENUS PAR UN ALGORITHME QUI CALCULE L'EXPONENTIELLE D'UNE MATRICE

1. Introduction.....	111
2. Notation.....	111
3. Erreur de calcul.....	111
4. Erreur sur les coefficients.....	112
5. Estimation statistique de l'erreur.....	113
6. Méthode de permutation.....	114
7. Méthode de permutation-perturbation.....	114
8. Evaluation de la moyenne $\hat{e}_{ij}$ de l'erreur e_{ij}	115
9. Calcul du nombre de chiffres significatifs exacts du résultat....	116
10. Exemples de l'application pratique de la méthode de Vignes.....	117
11. Conclusion.....	121

Conclusion

122

Bibliographie

124

Dernière page d'une thèse

VU

Grenoble, le 27. 5. 80

Le Président de la thèse

Chatelin

Vu, et permis d'imprimer,

Grenoble, le 8 JUIN 1980

Le Président de l'Université
Scientifique et Médicale

J. P. Cau

J. P. CAU

