MAT 6470/6473. TP6: La méthode GMRES[1]

À remettre au plus tard à 21h00 le 4 avril 2024 - un rapport par mini-groupe, électroniquement par StudiUM.

Soit $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ une matrice non-singulière et $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ un vecteur. Supposer que $A = QHQ^T$ où $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ est une matrice orthogonale et $H \in \mathbb{R}^{m\times m}$ est une matrice de Hessenberg supérieure. Soit l'espace de Krylov de dimension $n(\leq m)$

$$\kappa_n := \langle \boldsymbol{b}, A\boldsymbol{b}, \ldots, A^{n-1}\boldsymbol{b} \rangle. \tag{1}$$

L'idée de la méthode GMRES ("Generalised Minimal Residual Method" [1]) est d'approximer la solution exacte ($\boldsymbol{x}^*$, disons) du système d'équations

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \tag{2}$$

par le vecteur $\boldsymbol{x}_n \in \kappa_n$ qui minimise la norme euclidienne du résidu $\boldsymbol{r}_n := \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_n$.

Questions

1. Soit

$$Q_n := \left(\begin{array}{c|c|c|c} & & & \\ \boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_n \\ & & & \\ & & & \end{array} \right),$$

la matrice dans $\mathbb{R}^{m\times n}$ formée des n premières colonnes de Q et construite par la méthode d'Arnoldi (voir la Section 7.4 des notes de cours). Montrer que le problème à moindre carrés:

Trouver $\boldsymbol{x}_n \in \kappa_n$ qui minimise

$$\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_n\|_2, \tag{3}$$

peut être réécrit comme:

Trouver $\boldsymbol{y}_n \in \mathbb{R}^n$ qui minimise

$$\|\boldsymbol{b} - AQ_n\boldsymbol{y}_n\|_2. \tag{4}$$

2. Nous introduisons la sous-matrice principale de taille $n+1 \times n$ de H, notée

$$\widetilde{H}_n \in \mathbb{R}^{n+1\times n} := \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & \ddots & & h_{2n} \\ 0 & & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & h_{n,n-1} & h_{nn} \\ 0 & \cdots & 0 & h_{n+1,n} \end{pmatrix}. \tag{5}$$

[1] La notation utilisée dans ce TP est la même que dans la Section 7.4 des notes de cours.

Justifier rigoureusement toutes les étapes suivantes:

$$\begin{aligned}
&\arg\min_{\boldsymbol{y}_n\in\mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{b} - AQ_n\boldsymbol{y}_n\|_2,\\
=&\arg\min_{\boldsymbol{y}_n\in\mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{b} - Q_{n+1}\widetilde{H}_n\boldsymbol{y}_n\|_2,\\
=&\arg\min_{\boldsymbol{y}_n\in\mathbb{R}^n} \|Q_{n+1}^T\boldsymbol{b} - \widetilde{H}_n\boldsymbol{y}_n\|_2,\\
=&\arg\min_{\boldsymbol{y}_n\in\mathbb{R}^n} \|\|\boldsymbol{b}\|_2\boldsymbol{e}_1 - \widetilde{H}_n\boldsymbol{y}_n\|_2,
\end{aligned} \tag{6}$$

où $\boldsymbol{e}_1 = (1,0,\ldots,0)^T \in \mathbb{R}^{n+1}$.

3. Au pas n de la méthode GMRES, on résout le problème à moindres carrés (6) pour obtenir le $\boldsymbol{y}_n \in \mathbb{R}^n$ qui minimise $\|\|\boldsymbol{b}\|_2\boldsymbol{e}_1 - \widetilde{H}_n\boldsymbol{y}_n\|_2$ et ensuite on écrira $\boldsymbol{x}_n = Q_n\boldsymbol{y}_n$.

   Écrire *vous-même* un script MATLAB basé sur l'algorithme 35.1 de Trefethen et Bau [2] (voir l'Annexe) pour résoudre numériquement l'équation (2) avec la méthode GMRES.
   Consignes:

   (a) La solution $\boldsymbol{y}_n$ ($n = 1,2,3,\ldots$) de (6) devrait être trouvée en utilisant une factorisation QR, obtenue avec des rotations de Givens (voir la Section 3.4.3 des notes de cours).

   (b) Plutôt que de construire les factorisations QR des matrices $\widetilde{H}_1, \widetilde{H}_2, \widetilde{H}_3, \ldots$ indépendamment, vous devriez économiser sur les coûts de calcul en obtenant la factorisation QR de $\widetilde{H}_n$ à partir de celle de $\widetilde{H}_{n-1}$, dans $O(n)$ opérations. Voir l'exercice 35.4 de Trefethen et Bau [2].

4. Utiliser votre script MATLAB de la question 3 pour obtenir la solution numérique $\boldsymbol{x}_n$ de (2) quand $m = 200$ et

   ```
   A=2*eye(m)+0.5*randn(m)/sqrt(m);  b=ones(m,1);
   ```

   Dans votre script, vous devriez ajouter la commande `rng('default')` juste avant la ligne ci-dessus pour initialiser le générateur de nombres aléatoires.

   (a) Calculer la solution "exacte" `x*=A\b`. Produire un graphique `semilogy` de l'erreur $\|\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_n\|_2$ en fonction de $n = 1,2,3,\ldots,24$ et montrer numériquement que $\|\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{x}_n\|_2 \approx CD^{-n}$ pour des constantes C et D que vous devriez déterminer. Ajouter le graphique de CD^{-n} sur la même figure. Commenter.

   (b) Montrer numériquement sur une figure que la factorisation QR de $\widetilde{H}_n$ (calculée à partir de celle de $\widetilde{H}_{n-1}$ ($n = 2,3,\ldots,200$)) ne nécessite que $O(n)$ opérations arithmétiques. (Conseil: pour rendre le graphique du coût de calcul en fonction de n plus lisse, vous souhaiterez exécuter votre code plusieurs fois et trouver le temps CPU moyen, pour chaque valeur de n).

Références

[1] Y. Saad et M. H. Schultz, GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **7**, 856–869 (1986).

[2] L. N. Trefethen et D. Bau, Numerical Linear Algebra, SIAM, Philadelphia, 1997.

Annexe: l'algorithme 35.1 de Trefethen et Bau [2]

$\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{b}/\|\boldsymbol{b}\|_2$.

pour $n = 1, 2, 3, \ldots$

$\quad$ $\langle$Étape n de la méthode d'Arnoldi (algorithme 4 des notes de cours)$\rangle$

$\quad$ Trouver $\boldsymbol{y}_n \in \mathbb{R}^n$ qui minimise $\| \|\boldsymbol{b}\|_2 \boldsymbol{e}_1 - \widetilde{H}_n \boldsymbol{y}_n \|_2$.

fin