Rapport

TP1 : Méthodes GMRES et FOM

Réalisé par

Mathilde Ferreira
Félix Foucher de Brandois

ENSEEIHT - Formation ModIA, 5e année 2024-2025

1 Introduction

On cherche à résoudre le système linéaire : $Ax = b$
avec $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ une matrice creuse, symétrique définie positive, $b \in \mathbb{R}^n$ et $x \in \mathbb{R}^n$.

Pour cela on considère les méthodes itératives GMRES et FOM et on s'intéressera aux historiques de convergence de ces méthodes en termes de norme relative du résidu, définie par :

$$\eta_b^N(x_m) = \frac{||b - Ax_m||}{||b||}.$$

où x_m représente la solution approchée à l'itération m. Les itérations sont arrêtées lorsque cette norme relative du résidu atteint un seuil ϵ prédéfini ou lorsqu'un nombre maximum d'itérations est atteint.

Dans ce rapport, nous présentons les résultats obtenus, notamment le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la convergence et la précision obtenue pour chaque méthode. Nous illustrons également l'évolution de la norme du résidu au fil des itérations et comparons ces résultats avec ceux obtenus par la fonction `gmres` de MATLAB. On s'intéresse également à l'impact de la tolérance ϵ sur la convergence des méthodes GMRES et FOM.

2 Algorithme GMRES

Nous avons adapté l'algorithme GMRES (Generalized Minimal Residual) pour qu'il s'arrête lorsque l'itéré courant vérifie le critère de convergence (erreur inverse relative inférieure à une certaine tolérance) ou lorsque le nombre d'itérations est supérieur au nombre d'itérations maximum accepté.

Algorithm 1 GMRES - Modified Gram-Schmidt (MGS) variant

Set the initial guess x_0
Compute $r_0 = b - Ax_0$, $\beta = ||r_0||$
Set $v_1 = r_0/\beta$
Compute relative residual : relres = $\beta/||b||$
Initialize iteration counter : $j = 1$
while relres > tol **and** $j \leq$ maxit **do**
    Compute $w_j = Av_j$
    for $i = 1$ `to` j **do**
        $h_{i,j} = v_i^T w_j$
        $w_j = w_j - h_{i,j} v_i$
    end for
    Compute $h_{j+1,j} = ||w_j||$
    Normalize : $v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j}$
    Compute QR decomposition : $Q, R = \text{qr}(\bar{H})$
    Compute $g = Q^T \beta e_1$
    Solve the least-squares problem : $y = \arg\min ||g - Ry||$
    Compute residual estimate : $r_j = |g_{j+1}|$
end while
Compute solution : $x_m = x_0 + V_m y_m$

Pour éviter de calculer le résidu à chaque itération, nous faisons l'estimation de la norme du résidu en utilisant la relation suivante :

$$r_j = |g_{j+1}|$$

où g_{m+1} est le dernier élément de g après la résolution du problème de moindres carrés.

3 Algorithme FOM

Nous avons également implémenté l'algorithme FOM (Full Orthogonalization Method) en remplaçant le calcul du résidu par l'estimation de la norme du résidu :

$$r_j = h_{j+1,j}|e_j^T y_j|$$

Algorithm 2 FOM - Full Orthogonalization Method

```
Set the initial guess x_0
Compute r_0 = b − A x_0, β = ||r_0||
Set v_1 = r_0/β
Compute relative residual : relres = β/||b||
Initialize iteration counter : j = 1
while relres > tol and j ≤ maxit do
    Compute w_j = A v_j
    for i = 1 to j do
        h_{i,j} = v_i^T w_j
        w_j = w_j − h_{i,j} v_i
    end for
    Compute h_{j+1,j} = ||w_j||
    Normalize : v_{j+1} = w_j / h_{j+1,j}
    Compute y_j = H^{−1} β e_1
    Compute residual estimate : r_m = h_{j+1,j} |e_j^T y_j|
end while
Compute solution : x_m = x_0 + V_m y_m
```

4 Résultats

Matrice	Taille de la matrice	Méthode	Nb itérations	Erreur relative
`mat1.mat`	573	FOM	174	1.99e-08
		GMRES	172	4.90e-08
		GMRES matlab	172	4.90e-08
`pde225_5e-1.mat`	225	FOM	56	1.26e-07
		GMRES	55	2.41e-07
		GMRES matlab	55	2.41e-07
`hydcar20.mat`	99	FOM	99	2.33e-12
		GMRES	99	2.69e-12
		GMRES matlab	99	4.29e-12

TABLE 1 – Résultats pour $eps = 10^{-6}$

Les résultats obtenues avec GMRES sont très proche de sa version matlab ce qui suggère que notre implémentation est correcte.

Pour toutes les matrices, GMRES (et sa version Matlab) converge légérement plus rapidement que FOM en termes de nombre d'itérations, mais les erreurs relatives sont souvent légèrement plus grandes pour GMRES. Cependant les erreurs relatives restent très faible ce qui indique une bonne convergence des méthodes.

Les performances des méthodes dépendent des caractéristiques de la matrice.
Pour des matrices plus petites comme `hydcar20.mat`, les erreurs sont extrêmement faibles, tandis que pour des matrices plus grandes comme `mat1.mat`, elles sont plus élevées.
Dans le cas de `hydcar20.mat`, le nombre d'itération est égale au la taille de la matrice, ainsi la convergence a été atteinte au maximum d'itérations.

La figure 4 illustre l'évolution de la norme du résidu en fonction des itérations pour les trois matrices considérées : `mat1.mat`, `pde225_5e-1.mat` et `hydcar20.mat`.

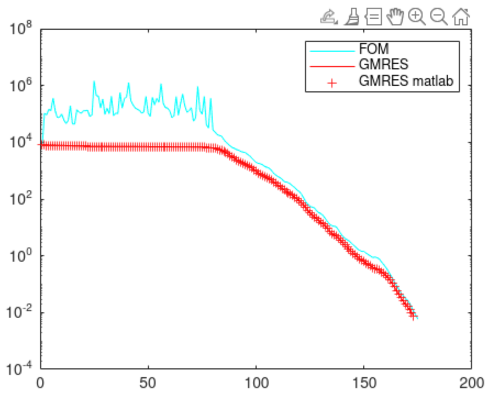

FIGURE 1 – mat1

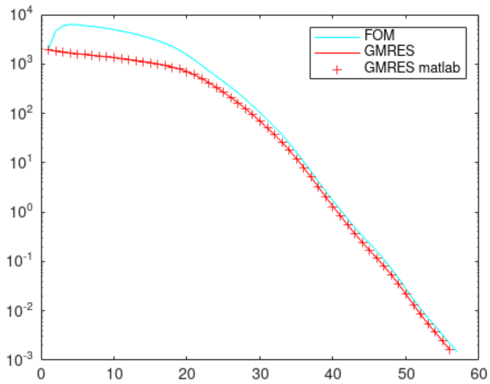

FIGURE 2 – pde225_5e-1

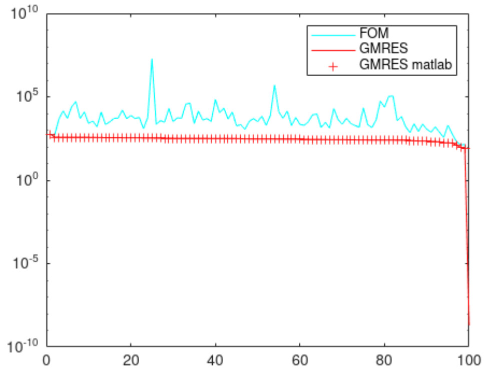

FIGURE 3 – hydcar20

FIGURE 4 – Evolution du résidu en fonction des itérations

On remarque que la courbe de GMRES s'aligne avec celle de GMRES de matlab. On observe bien une convergence du résidu avec FOM et GMRES pour toutes les matrices. La méthode FOM est parfois bruité dans ses premières itérations, elle semble plus sensible aux propriétés des matrices que la méthode GMRES.

Impact de la tolérance ϵ sur la convergence
On a fait varier la tolérance afin de voir son impact sur la convergence des méthodes GMRES et FOM.

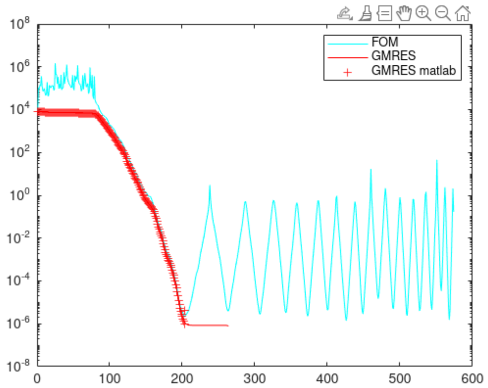

FIGURE 5 – mat1 avec $eps = 10^{-10}$

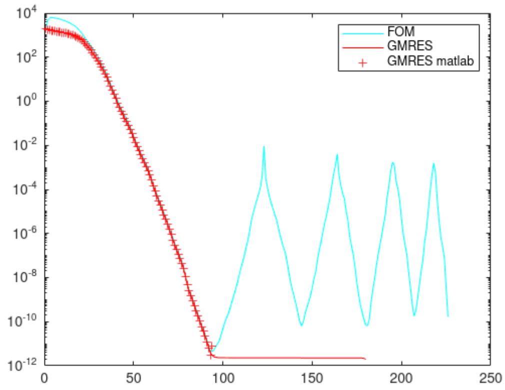

FIGURE 6 – pde225_5e-1 avec $eps = 10^{-15}$

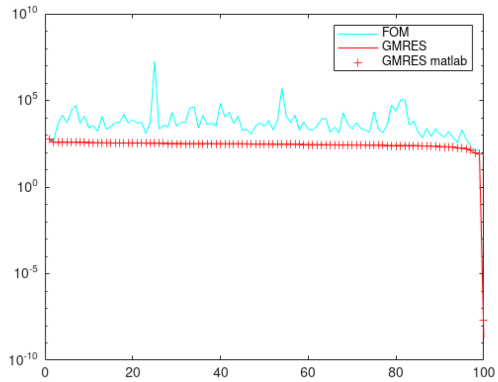

FIGURE 7 – hydcar20 avec $eps = 10^{-12}$

FIGURE 8 – Evolution du résidu en fonction des itérations

On observe que lorsque la tolérance est trop faible, les méthodes ne convergent pas.