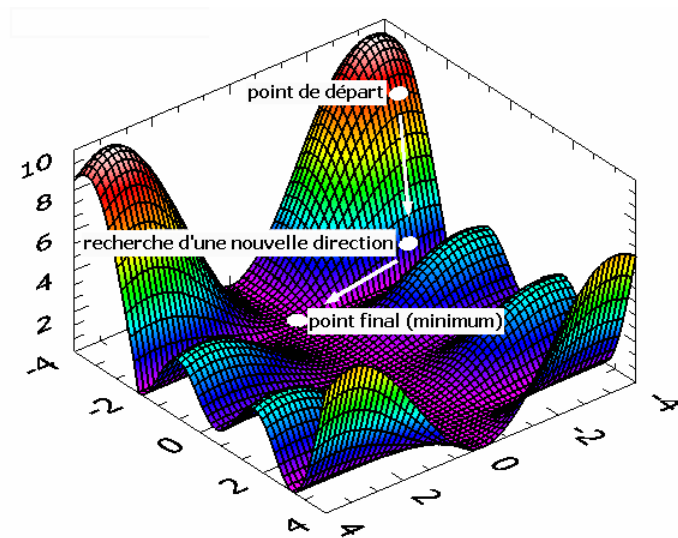


INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUÉES DE
ROUEN



PROJET MMSN GM3 - VAGUE 3 - SUJET 4

Etude des erreurs sur la méthode du gradient conjugué



Auteurs :

Thibaut ANDRÉ-GALLIS
thibaut.andregallis@insa-rouen.fr
Kévin GATEL
kevin.gatel@insa-rouen.fr

Enseignants :

Bernard GLEYSE
bernard.gleyse@insa-rouen.fr

6 Juin 2021

Table des matières

Introduction	2
1 Présentation du problème	3
2 Vecteur résidu r	4
2.1 Préambule	4
2.2 Etape 0	6
2.3 Etape 1	7
2.4 Etape 2	8
2.5 Etape 3	9
2.6 Etape 4	10
2.7 postambule	10
3 Vecteur solution x	11
3.1 Etape 1	11
3.2 Etape 2	13
3.3 Etape 3	13
3.4 Etape 4	13
4 Analyse numérique du problème	15
Conclusion	16

Introduction

Pour commencer, nous avons longtemps pensé que les calculatrices et les ordinateurs étaient les références absolues en termes de calcul mathématique. Qu'ils ne se trompaient jamais pourvu qu'on leur donne le bon calcul. Cependant, nous avons par la suite découvert que les réels n'existaient pas en machine et qu'on utilisait les flottants pour les représenter. Nous ne détaillerons pas la construction des flottants, ce n'est pas notre sujet mais il est important de connaître leur existence. De cela nous avons compris qu'il était impossible de représenter tous les réels par les flottants. Cela entraînera forcément des erreurs inévitables lors des calculs.

C'est là tout le sujet de notre projet, les erreurs. En effet, nous allons nous intéresser aux erreurs de calculs survenues lors de la résolution d'un système linéaire sur machine. Plus particulièrement avec la méthode du gradient conjugué que nous avons déjà étudié auparavant lors d'un précédent projet. Nous allons donc à l'aide de la valeur binaire des nombres et de la connaissance de la construction des flottants pouvoir étudier et quantifier les erreurs survenues lors de la résolution d'un système linéaire.

Pour obtenir une étude plus large, tous les calculs ont été réalisés sur deux machines différentes dont les caractéristiques ont été détaillées dans le fichier "README". Nous pourrions par conséquent les comparer pour remarquer des éventuelles différences d'une machine à l'autre.

1. Présentation du problème

L'objectif est donc d'étudier les erreurs que fait la machine en utilisant l'arithmétique flottante plutôt que l'ensemble théorique des réels.

Ces erreurs seront étudiées sur la solution du problème linéaire $Ax = b$ avec la méthode du gradient conjugué. En choisissant la matrice A de dimension 4 définie comme ci-dessous :

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} \end{pmatrix}$$

FIGURE 1.1 – Matrice de Hilbert de dimension 4

Le nombre d'étape pour trouver la solution sera en théorie inférieur ou égal à 4 (assuré par la méthode du gradient conjugué).

En notant $K_2(A)$ le conditionnement 2 de A tel que :¹

$$K_2(A) = 1.5514 * 10^4$$

On a l'inégalité du conditionnement pour majorer l'erreur :

$$\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2} \leq K_2(A) \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2}$$

Le test d'arrêt est de la forme

$$tol^2 * (b, b) > (r, r)$$

avec (\bullet, \bullet) le produit scalaire usuel et $tol = 10^{-10}$.

Enfin, le vecteur b est choisi comme ci-dessous :

$$b_i = \sum_{k=1}^4 A_{ik}$$

de manière à avoir

$$x^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

1. conditionnement obtenu sur Matlab

2. Vecteur résidu r

2.1 Préambule

Premier élément d'intérêt de notre projet, le vecteur résidu. Intéressons-nous aux erreurs faites par la machine sur ce vecteur. Nous ne reviendrons pas sur le rôle du vecteur résidu dans la méthode du gradient conjugué mais il est essentiel au bon fonctionnement de celle-ci. Désormais, nous allons expliquer la démarche utilisée pour étudier cette erreur.

[illegible]

FIGURE 2.1 – Capture d’écran avec le logiciel *qdb*

Comme on peut le voir ci-dessus, nous avons utilisé le logiciel *gdb* avec notre programme de gradient conjugué. On utilise le logiciel *gdb* pour obtenir certaines valeurs pendant le déroulement du programme et pas uniquement à la fin. En ce qui nous concerne, nous récupérons les valeurs des composantes du vecteur résidu ainsi que leurs valeurs binaires qui seront importantes pour la suite. La composante `r2` est la norme 2 au carré du vecteur résidu et c'est précisément ce que nous allons comparer avec notre calcul pour trouver l'erreur.

2.2 Etape 0

```
R(1) = -2.0833333333333330372
R(1)^2 = 4.34027777777777765439

R(2) = -1.2833333333333332149
R(2)^2 = 1.6469444444444441405

R(3) = -0.94999999999999984455
R(3)^2 = 0.90249999999999970465

R(4) = -0.7595238095238094900
R(4)^2 = 0.5768764172335600393

R2= Z = 7.4665986394557811

z = R(1)^2+R(2)^2+R(3)^2+R(4)^2 = 7.4665986394557804284
on ramène z au même nombre de chiffres significatifs que Z :
z = 7.4665986394557804

On calcule l'erreur absolue :
|Z-z|= 7.0×10-16

On calcule l'erreur relative :
|Z-z|/|z|= 9.3750854144079325033×10-17
```

FIGURE 2.3 – Fichier d'erreur à l'étape 0

On peut voir que l'erreur absolue est de 10^{-16} et l'erreur relative de 10^{-17} . On est autour de la précision machine pour une double précision et l'erreur relative reste extrêmement faible. On peut être plutôt satisfait du résultat.

2.3 Etape 1

```
R(1) = 0.075564218764801793782
R(1)^2 = 0.0057099511575348235292

R(2) = -0.041493362400282896019
R(2)^2 = 0.00172169912328121037408

R(3) = -0.060221912677967504024
R(3)^2 = 0.00362667876659274319203

R(4) = -0.061834564034294547952
R(4)^2 = 0.00382351330931127284155

R2= Z = 0.014881842356720050360

z = R(1)^2+R(2)^2+R(3)^2+R(4)^2 = 0.01488184235672004993686
on ramène z au même nombre de chiffres significatifs que Z :
z = 0.014881842356720049937

On calcule l'erreur absolue :
|Z-z|= 4.23 × 10^-19

On calcule l'erreur relative :
|Z-z|/|z|= 2.8423900069670471420 × 10^-17
```

FIGURE 2.4 – Fichier d'erreur à l'étape 1

Cette fois l'erreur absolue est de 10^{-19} et la relative de 10^{-17} c'est même moins que l'étape d'avant.

2.4 Etape 2

```
R(1) = -0.00020922549391372280425
R(1)^2 = 4.3775307303441258204 × 10^-8

R(2) = 0.00084327357243061534797
R(2)^2 = 7.1111031795989226947 × 10^-7

R(3) = -0.00010617738802128767750
R(3)^2 = 1.1273637727023083988 × 10^-8

R(4) = -0.00071814222741654887283
R(4)^2 = 5.1572825879880219955 × 10^-7

R2= Z = 1.2818875217891588983 × 10^-6

z = R(1)^2+R(2)^2+R(3)^2+R(4)^2 = 1.281887521789158811212 × 10^-6
on ramène z au même nombre de chiffres significatifs que Z :
z = 1.2818875217891588112 × 10^-6

On calcule l'erreur absolue :
|Z-z|= 8.71 × 10^-23

On calcule l'erreur relative :
|Z-z|/|z|= 6.7946679033455759453 × 10^-17
```

FIGURE 2.5 – Fichier d'erreur à l'étape 2

Une fois de plus, l'erreur absolue diminue elle est de 10^{-23} . Cependant, quand on regarde l'erreur relative en 10^{-17} , on se rend compte qu'elle n'a pas diminué.

2.5 Etape 3

```
R(1) = 6.3762514465349204654 × 10-8
R(1)2 = 4.0656582509438665698 × 10-15

R(2) = -7.1261809844009541687 × 10-7
R(2)2 = 5.0782455422437752201 × 10-13

R(3) = 1.7086666279479700587 × 10-6
R(3)2 = 2.9195416454630867353 × 10-12

R(4) = -1.1079901479170818981 × 10-6
R(4)2 = 1.2276421678813170240 × 10-12

R2= Z = 4.6590740258197256465 × 10-12

z = R(1)2+R(2)2+R(3)2+R(4)2 = 4.6590740258197251478798 × 10-12
on ramène z au même nombre de chiffres significatifs que Z :
z = 4.6590740258197251479 × 10-12

On calcule l'erreur absolue :
|Z-z|= 4.986 × 10-28

On calcule l'erreur relative :
|Z-z|/|z|= 1.0701697316609505809 × 10-16
```

FIGURE 2.6 – Fichier d'erreur à l'étape 3

Encore on a une baisse de l'erreur absolue 10^{-28} mais l'erreur relative a tendance à remonter légèrement mais elle reste très faible.

2.6 Etape 4

```
R(1) = -1.8496094094546590994 × 10^-9
R(1)^2 = 3.4210549675432127775 × 10^-18

R(2) = -1.0549208854453946002 × 10^-9
R(2)^2 = 1.1128580745488953568 × 10^-18

R(3) = -7.5272766610903494634 × 10^-10
R(3)^2 = 5.6659893932595479735 × 10^-19

R(4) = -5.8876035491499310013 × 10^-10
R(4)^2 = 3.4663875551962863992 × 10^-19

R2= Z = 5.4471507369376917257 × 10^-18

z = R(1)^2+R(2)^2+R(3)^2+R(4)^2 = 5.44715073693769157157 × 10^-18
on ramène z au même nombre de chiffres significatifs que Z :
z = 5.4471507369376915716 × 10^-18

On calcule l'erreur absolue :
|Z-z|= 1.541 × 10^-34

On calcule l'erreur relative :
|Z-z|/|z|= 2.8290019395834227425 × 10^-17
```

FIGURE 2.7 – Fichier d'erreur à l'étape 4

Nous avons une nouvelle fois une baisse de l'erreur absolue à 10^{-32} . L'erreur relative reste quant à elle aux alentours de 10^{-17} comme depuis le début.

2.7 postambule

On a pu voir que l'erreur absolue avait tendance à diminuer et l'erreur relative à stagner autour de 10^{-17} . Il est en fait logique que l'erreur absolue diminue car le vecteur résidu diminue à chaque itération du programme. C'est pourquoi il est souvent plus judicieux de regarder l'erreur relative qui est plus représentative.

A ce propos, elle est plutôt très faible et on peut être satisfait du résultat obtenu.

3. Vecteur solution x

Intéressons-nous maintenant au vecteur solution x . On rappelle que la solution théorique attendue est le vecteur :

$$x^T = (1 \quad 1 \quad 1 \quad 1)$$

Dans cette partie nous allons étudier les erreurs locales sur le vecteur solution \hat{x} obtenu avec la méthode du gradient conjugué :

$$\hat{x}_{n+1} = \hat{x}_n - \alpha * p_n$$

avec

$$\alpha = \frac{(r_n, r_n)}{(Ap_n, p_n)}$$

On se propose d'étudier chaque composante du vecteur sur 4 étapes.

3.1 Etape 1

Pour chaque étape, on récupère les données en binaire grâce à *gdb* puis on les stocke dans des fichiers comme ci-dessous :

```
(gdb) print x //x_0
$6 = (0, 0, 0, 0)
(gdb) x/tg &x(1)
0x555555561af0: 0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
(gdb) x/tg &x(2)
0x555555561af8: 0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
(gdb) x/tg &x(3)
0x555555561b00: 0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
(gdb) x/tg &x(4)
0x555555561b08: 0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
```

FIGURE 3.1 – Composantes de x à l'étape 0

```
(gdb) print alpha
$7 = 0.66806923697271459
(gdb) x/tg &alpha
0x7fffffde70: 001111111110010101100000110100101011100100010000101111000010010
```

FIGURE 3.2 – Valeur de α à l'étape 0

```
(gdb) print p //p_0
$8 = (-2.0833333333333333, -1.2833333333333332, -0.94999999999999984, -0.75952380952380949)
(gdb) x/tg &p(1)
0x555555561b80: 1100000000000000101010101010101010101010101010101010101010101010
(gdb) x/tg &p(2)
0x555555561b88: 1011111111110100100010001000100010001000100010001000100010001000
(gdb) x/tg &p(3)
0x555555561b90: 1011111111101100110011001100110011001100110011001100110011001100101
(gdb) x/tg &p(4)
0x555555561b98: 10111111111010000100111000000100111000000100111000000100111000000
```

FIGURE 3.3 – Composantes de p à l'étape 0

```

(gdb) print x //x_1
$9 = (1.391810910359822, 0.85735552078165034, 0.63466577512407873, 0.50741449189118082)
(gdb) x/tg &x(1)
0x555555561af0: 00111111111011001000100110110111000010001100110110000111111101
(gdb) x/tg &x(2)
0x555555561af8: 0011111111101101101101110110110011011000010110011010101111101100
(gdb) x/tg &x(3)
0x555555561b00: 0011111111100100010011110010111010011001100000011000110010010000
(gdb) x/tg &x(4)
0x555555561b08: 0011111111100000001111001011110101010001000001100000110011101111

```

FIGURE 3.4 – Composantes de x à l'étape 1

Une fois les valeurs binaires obtenues, on peut alors calculer leur valeur. Soit par l'ordinateur, qui est en double précision donc qui aura des erreurs de l'ordre de 10^{-16} , soit par un plus grand calculateur¹, c'est ce qu'on se propose de faire.

On stocke également ces résultats dans des fichiers de manière à les comparer plus tard comme dans l'exemple ci-dessous :

```

x_1(4):
0011111111100000001111001011110101010001000001100000110011101111

bit de signe : 0
bits d'exposants : 01111111110
bits de mantisses : 0000001111001011110101010001000001100000110011101111

Le nombre est positif car le bit de signe est à 0 ; normalisé car les bits d'exposants sont
différents de : 000..0

exposant biaisé =
2^(- 9)+2^(- 8)+2^(- 7)+2^(- 6)+2^(- 5)+2^(- 4)+2^(- 3)+2^(- 2)+2^(- 1)+0 = 1022

exposant réel = 1022-d = 1022-1023 = -1

mantisse =
2^(- 7) + 2^(- 8) + 2^(- 9) + 2^(-10) + 2^(-13) + 2^(-15) + 2^(-16) + 2^(-17) + 2^(-18) + 2^(-20) +
2^(-22) + 2^(-24) + 2^(-28) + 2^(-34) + 2^(-35) + 2^(-41) + 2^(-42) + 2^(-45) + 2^(-46) + 2^(-47) +
2^(-49) + 2^(-50) + 2^(-51) + 2^(-52) + 0 = 66783805836527/4503599627370496

Valeur décimale exacte : ((-1)^0)*(1+66783805836527/4503599627370496)*(2^(- -1)) =
0.50741449189118081886

```

FIGURE 3.5 – Calcul précis de la 4^{eme} composante de x à l'étape 1

Une fois le calcul précis de toutes les composantes de nos variables, on pourra alors comparer nos valeurs en local de manière à obtenir nos erreurs absolues et relatives. On obtient un fichier du type :

```

x_0 = (0,0,0,0)
alpha = 0.66806923697271458629
p_0= (-2.08333333333333330373,-1.283333333333332149,-0.94999999999999984457,-0.75952380952380948997)
x_1 = Z = (1.3918109103598219622,0.85735552078165033763,0.63466577512407873485,0.50741449189118081886)
z = x_0 - alpha*p_0 = [1.3918109103598218570, 0.8573555207816503066, 0.6346657751240787531, 0.50741449189118081793]

On calcule l'erreur absolue pour chaque composante, afin d'obtenir le vecteur erreur absolue:
|Z-z|=(1.052x10^-16, 3.103x10^-17, 1.825x10^-17, 9.3x10^-19)

On calcule l'erreur relative pour chaque composante, afin d'obtenir le vecteur erreur relative:
|Z-z|/|z|= (7.5584980126936116695x10^-17,3.6192686986735648614x10^-17,2.8755292494592258677x10^-17,1.8328211252575854608x10^-18)

```

FIGURE 3.6 – Fichier erreur final obtenu pour l'étape 1

On s'intéresse seulement à ces deux lignes pour conclure :

1. wolframalpha.com

$$|Z-z|=(1.052\times 10^{-16}, 3.103\times 10^{-17}, 1.825\times 10^{-17}, 9.3\times 10^{-19})$$

FIGURE 3.7 – Vecteur erreur absolue pour l'étape 1

$$|Z-z|/|z|=(7.5584980126936116695\times 10^{-17}, 3.6192686986735648614\times 10^{-17}, 2.8755292494592258677\times 10^{-17}, 1.8328211252575854608\times 10^{-18})$$

FIGURE 3.8 – Vecteur erreur relative pour l'étape 1

On remarque que l'erreur relative pour toutes les composantes de \hat{x} est inférieure à l'erreur machine 10^{-16} ce qui est plutôt bien, les calculs se sont bien passés informatiquement.

3.2 Etape 2

De même pour l'étape 2, on obtient les valeurs des différentes variables en binaire, nous calculons leur valeur exacte grâce à un calculateur² très performant afin d'avoir une très grande précision puis on compare le résultat final Z que donne le programme avec celui calculé sur le calculateur z . On obtient ces résultats :

$$|Z-z|=(7.91\times 10^{-18}, 5.3\times 10^{-17}, 4.6\times 10^{-17}, 7.26\times 10^{-18})$$

FIGURE 3.9 – Vecteur erreur absolue pour l'étape 2

$$|Z-z|/|z|=(8.1502959739600690275\times 10^{-18}, 4.7438527536177694312\times 10^{-17}, 4.5948761769806162385\times 10^{-17}, 8.2393453677395306607\times 10^{-18})$$

FIGURE 3.10 – Vecteur erreur relative pour l'étape 2

Les erreurs sont de l'ordre de 10^{-18} bien inférieur à la précision machine 10^{-16} . Les calculs se sont également bien passés.

3.3 Etape 3

Même chose pour l'étape 3, on obtient :

$$|Z-z|=(4.91 \times 10^{-17}, 4.08 \times 10^{-17}, 2.25 \times 10^{-17}, 3.69 \times 10^{-17})$$

FIGURE 3.11 – Vecteur erreur absolue pour l'étape 3

$$|Z-z|/|z|=(4.9068020752442432596\times 10^{-17}, 4.1101587690637775815\times 10^{-17}, 2.2109434838433733709\times 10^{-17}, 3.7328716479168916341\times 10^{-17})$$

FIGURE 3.12 – Vecteur erreur relative pour l'étape 3

Les erreurs sont cette fois-ci de l'ordre de 10^{-17} , toujours inférieur à 10^{-16} ce qui indique que les calculs se sont bien passés.

3.4 Etape 4

Même démarche pour cette dernière étape, on obtient :

2. sur *wolframalpha.com*

$$|Z-z| = (2.57 \times 10^{-17}, 4.94 \times 10^{-17}, 4.9 \times 10^{-18}, 5.14 \times 10^{-17})$$

FIGURE 3.13 – Vecteur erreur absolue pour l'étape 4

$$|Z-z|/|z| = (2.5700000031647810540 \times 10^{-17}, 4.9400000034808270286 \times 10^{-17}, 4.9000000024584155077 \times 10^{-18}, 5.1400000020277781816 \times 10^{-17})$$

FIGURE 3.14 – Vecteur erreur relative pour l'étape 4

Les erreurs sont de l'ordre de 10^{-17} une nouvelle fois, on conclut alors que l'ensemble des calculs pour les 4 étapes se sont bien déroulés informatiquement.

4. Analyse numérique du problème

Analysons maintenant le problème numériquement. On sait que la solution théorique est

$$x^T = (1 \quad 1 \quad 1 \quad 1)$$

Comparons maintenant ce résultat avec celui qu'on a obtenu numériquement au bout de la 4^{eme} étape :

$$\hat{x}^T = (0.9999999987685677105 \quad 0.9999999992953791939 \quad 0.9999999994982825546 \quad 0.99999999960549057491)$$

On peut maintenant obtenir l'erreur absolue pour chaque composante afin d'obtenir le vecteur absolu :¹

$$\varepsilon_{abs} = (1.2314322895 * 10^{-9} \quad 7.046208061 * 10^{-10} \quad 5.017174454 * 10^{-10} \quad 3.9450942509 * 10^{-10})$$

On remarque que l'on obtient le même vecteur pour le vecteur erreur relative puisqu'on divise toutes les composantes par 1 :

$$\varepsilon_{rel} = (1.2314322895 * 10^{-9} \quad 7.046208061 * 10^{-10} \quad 5.017174454 * 10^{-10} \quad 3.9450942509 * 10^{-10})$$

On observe des erreurs beaucoup plus élevées que celles obtenues localement. En effet, pour une étude locale, on obtenait des erreurs d'ordre de grandeur d'environ 10^{-17} alors qu'ici il est d'environ 10^{-10} . Une différence de 10^7 qui n'est pas négligeable.

Cependant, on peut souligner l'efficacité de la méthode car en seulement 4 itérations, l'erreur de la solution obtenue par rapport à celle théorique est de seulement 10^{-9} . Si l'on veut obtenir plus de précision, il suffit de diminuer la tolérance et d'observer davantage d'étapes.

1. calcul effectué sur *wolframalpha.com*

Conclusion

Pour conclure, on a pu observer l'évolution de l'erreur absolue et de l'erreur relative sur deux éléments différents : le vecteur résidu et le vecteur x . On a constaté en général des résultats plutôt satisfaisants sur les deux éléments concernant la différence entre le résultat obtenu par machine et celui obtenu par un calcul manuel sensé servir de référence.

Premièrement, concernant le vecteur résidu. Tout d'abord on rappelle que le vecteur résidu a normalement tendance à diminuer en norme et il est même bien souvent important dans la condition d'arrêt. Nous avons remarqué une erreur absolue qui diminue, ce qui est logique car le vecteur converge. Cependant au niveau de l'erreur relative on a observé une stagnation autour de 10^{-17} ce qui est très satisfaisant, la précision machine étant de 10^{-16} en double précision. On peut donc conclure que le calcul s'est plutôt bien passé informatiquement.

Deuxièmement, par rapport au vecteur x . Ce dernier tend vers la solution théorique du système linéaire : le vecteur unitaire. On remarquera que la solution x final n'est pas exactement égale à la solution théorique mais c'est un autre sujet où le critère de tolérance a son importance. Dans notre cas, nous avons seulement comparé le résultat de la machine et celui calculé de notre côté. On peut voir que l'erreur reste toujours inférieure à 10^{-16} ce qui est la précision machine en double précision. On en conclut que les résultats sont très satisfaisants.

Pour finir, on peut résumer en disant que l'ensemble des calculs se sont bien déroulés informatiquement sur l'ensemble des flottants. Néanmoins, rien ne nous garantit qu'avec une autre méthode ou une autre matrice on aurait obtenu la même chose. Il serait intéressant de mener la même étude avec d'autres matrices plus grandes au conditionnement élevé et en variant les méthodes.