# TP8 : Quelques méthodes de résolution de systèmes linéaires

Ce TP porte sur les méthodes de résolution des systèmes linéaires. Les matrices utilisées seront celles obtenues par discrétisation par différences finis du Laplacien (les matrices obtenues par une discrétisation par éléments finis sont aussi valables) ou des matrices générées aléatoirement, satisfaisant certaines propriétés particulières (symétrie, définie positive, etc.).

On joint à cet effet des scripts MATLAB, pour la discrétisation par différences finies du Laplacien en 1D et 2D, et pour la génération aléatoire des matrices de propriétés particulières.

Cette fiche est constituée de 5 parties dont la partie 5 est un élément de réponse à la partie 4.

# PARTIE - 1 Méthodes directes

# Exercice - 1 Méthode de résolution par la factorisation LU

```
- Algorithme de résolution de systèmes triangulaires inférieures (à gauche) et supérieures (à droite) -
    ALGORITHME DE DESCENTE
                                                ALGORITHME DE REMONTEE
                                         1
Données: A,b. Résultat:x solution de A x=b| Données: A,b. Résultat:x solution de A x=b
pour i= 1 à n
                                         | pour i= n à 1
                                              s = 0
    pour j = 1 à i-1
                                                 pour j = i+1 à n
      s = s + A(i,j) * x(j)
                                                      s = s + A(i,j) * x(j)
                                                fin
    fin i
 x(i) = (b(i) - s) /A(i,i)
                                             x(i) = (b(i) - s)/A(i,i)
```

- Q-1 : Écrire une une fonction MATLAB de prototype function [x] = Descente (A, b), qui résout un système linéaire triangulaire inférieure Ax = b. Tester la fonction en générant aléatoirement des matrices triangulaires inférieures inversibles (voir ci-dessus), de tailles n et en effectuant : b = rand(n, 1), norm(b - Descente(A, A\*b)).
- **Q-2**: Même question pour les matrices triangulaires supérieures inversibles. La fonction aura pour prototype, function [x] = Remontee (A, b).
- **Q-3**: Écrire une fonction MATLAB de prototype function [L,U] = decompLU (A) qui effectue la décomposition LU d'une matrice carrée.

```
__ Algorithme de décomposition A = LU _
     Résultat: U triangulaire supérieure
                                                        Explications des notations et indications
     L triangulaire inférieure (diagonale unité) |
     pour k = 1 à n
                                                 |% : introduit un commentaire
     pour i = k+1 à n
              A(i,k) = A(i,k) / A(k,k)
               pour j = k+1 à n
                 A(i,j) = A(i,j) - A(i,k) *A(k,j)
               fin
10
11
     fin
                                                   Commande MATLAB pour récupérer L et U
12
     Récupérer L et U à partir de A
                                                  | U=triu(A); L = A - U + diag(ones(n,1));
```

**Q-3-1**: Évaluer cette fonction sur la matrice 
$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -4 & 1 \\ 3 & 6 & 1 & -2 \\ -1 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 4 & 1 \end{bmatrix}$$

Conclure en calculant tous les mineurs principaux d'ordre  $k, k = 1 \dots 3$  de A.

**Q-3-2** : On considère la matrice de permutation 
$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
.

Vérifier que le produit PA admet une factorisation LU, en évaluant [L, U] = decompLU(PA). Expliquer alors comment résoudre un système linéaire dont la matrice est la matrice A ci-dessus.

- Q-4 : La question précédente met en évidence la nécessité de pivot dans la factorisation LU de certaines matrices.
- **Q-4-1**: Montrer que pour toute matrice inversible  $A \in \mathcal{M}_m(\mathbb{R})$ , il existe une matrice de permutation P telle que la matrice PA admette une factorisation LU. Comparée à la factorisation LU, on a allégé les hypothèses sur la matrice A pour que la factorisation PA = LU soit possible. Lesquelles?
- **Q-4-2**: Écrire une fonction MATLAB de prototype [L, U, P] = decompLUP(A), qui effectue une factorisation LU d'une matrice régulière A selon une méthode de Gauss avec pivot partiel, c'est à dire avec une permutation de lignes. (L'algorithme est donné ci-dessous).

```
- Algorithme de décomposition PA =LU
Donnée: A. Résultats: A contenant L, et U
                                                   Explications des notations et indications
et P vecteur de permutation des lignes
pour i = 1 à n P(i) = i fin
                                             |% : introduit un commentaire
pour k = 1 à n
                                             |ipivot est telle que |A(ipivot,k)|=max|A(i,k)| k<= i <= n
                                           | commande MATLAB de recherche du pivot :
 recherche la ligne ipivot du pivot:
permuter les lignes P(ipivot) et P(k)
                                            |[vpivot,ipivot]=max(abs(A(k:n,k))); ipivot = k - 1 + ipivot;
pour i = k+1 à n
                                             \mid commande MATLAB pour permuter les lignes P(ipivot) et P(k):
           A(i,k) = A(i,k)/AA(k,k)
                                             |ip=P(ipivot); P(ipivot)=P(k);P(k)= ip;
          pour j = k+1 à n
                                             |v=A(k,:); A(k,:) = A(ipivot,:); A(ipivot,:) = v;
          A(i,j) = A(i,j)-A(i,k) * A(k,j)
    fin
```

# Exercice - 2 Complexité de la méthode de décomposition LU

- **Q-1** : Complexité de la factorisation.
- Q-1-1 : Modifier la fonction [L,U] = decompLU(A) de l'exercice précédent, en une fonction [L,U,nop] = decompLU\_nop(A) qui retourne en plus le nombre de multiplications et de divisions effectuées pendant la factorisation LU.

(On Pourra initialiser nop à 0 en début de fonction et l'incrémenter, dans les boucles de la factorisation LU, à chaque fois qu'on rencontre une multiplication ou une division (algo-lignes 7 et 9)).

Q-1-2 : Justifier l'existence de la factorisation LU d'une matrice symétrique définie positive. Générer des matrices symétriques définies positives de tailles  $n=1,\cdots 30$ . Relever Nop(n) fourni par la factorisation decompLU\_nop (A) et représenter sur un même graphique la courbe  $n\longmapsto Nop(n)$  et la courbe  $n\longmapsto n^3/3$ . Qu'observe-t-on? (On pourra utiliser le script MATLAB ci-dessous qui réalise cette expérience).

Q-1-3 : Reprendre la même expérience en ne représentant que la courbe  $n \longmapsto Nop(n)$  en échelle logarithmique. Déterminer la pente de la droite la plus proche de cette courbe et conclure. (On utilisera la commande MATLAB loglog pour la représentation en échelle logarithmique).

#### Exercice - 3 Phénomène de remplissage

- Q-1 : Modifier la factorisation LU de sorte qu'elle retourne les facteurs L, U dans une matrice de la taille de A; U étant stockée dans la partie supérieure et L (sauf sa diagonale) dans la partie inférieure. Le prototype de la fonction sera function [A]=decompLU\_eco(A).
- Q-2 : On considère la matrice de taille n définie sous MATLAB, pour n donnée, par : A = eye(n); A(:,1)=1; A(1,:)=1; A(1,1)=n;
- **Q-2-1**: Pour diverses valeurs de n, afficher la matrice A (commande spy). Afficher aussi la matrice  $B=decompLU_eco(A)$ . Qu'observe-t-on?
- Q-2-2 : Que retourne la commande MATLAB length (find (A) ) ? Comparer length (find (A) ) et length (find (decompLU\_eco (A) )). Conclure.

# PARTIE - 2 Méthodes directes : pratiques

### **Exercice -** 1 *Méthode de résolution par la factorisation Cholesky*

- Q-1 : Décomposition Cholesky et complexité.
- Q-1-1 : Écrire une fonction MATLAB de prototype function [L, Nop] = decompCholesky (A) qui effectue la décomposition Cholesky d'une matrice carrée symétrique définie positive et retourne le nombre Nop de multiplications et de divisions effectuées.
- **Q-1-2**: Générer aléatoirement des matrices symétriques définies positives (*voir* scripts joints) de taille  $n=5,\dots 30$  et représenter en échelle logarithmique, la courbe  $n\longmapsto \operatorname{Nop}(n)$ , où  $\operatorname{Nop}(n)$  est le nombre d'opérations fournies par la décomposition Cholesky précédente.

En déduire la complexité de la factorisation Cholesky; c'est-à-dire les constantes C et  $\alpha$ , telles que  $Nop(n) \approx Cn^{\alpha}$ . Comparer cette complexité à celle obtenue par la factorisation LU (voir Parties précédentes).

- **Q-2**: Inversion du système linéaire par la factorisation Cholesky.
- **Q-2-1**: Ecrire une fonction MATLAB de prototype function [x] = inverseCholesky(L,b) qui résout le système  $LL^Tx = b$ . Tester cette fonction sur quelques exemples.

# Exercice - 2 Discrétisation par différences finies du Laplacien en une et deux dimensions

### Q-1 : Matrice du Laplacien en une dimension d'espace

On considère le problème

chercher  $u \in c^2([0,1])$  telle que -u''(x) = f(x) dans  $]0,1[, u(0) = \alpha, u(1) = \beta;$  où  $f \in C([0,1])$  et  $\alpha,\beta$  sont deux nombres réels donnés.

On se propose de déterminer une solution approchée de cette équation par la méthode de différences finies.

- **Q-1-1** : Rappeler les différentes étapes à suivre pour discrétiser cette équation par différences finies. Donner l'expression de la matrice A et du second membre b de la formulation matricielle du problème discrétisé.
- Q-1-2 : Déterminer analytiquement les valeurs propres de la matrice A. Calculer le rapport entre la plus grande valeur propre et la plus petite valeur propre. Que devient ce rapport lorsque la taille N de la matrice tend vers l'infini. Conclure.
- Q-1-3 : Écrire deux fonctions MATLAB de prototype [A] = laplacelD(n) et [b] = SmlaplacelD(n, f, alpha, beta) retournant respectivement la matrice et le second membre de la discrétisation. Et montrer qu'on peut résoudre le système Au = b par la factorisation Cholesky.
- Q-1-4 : Choisir  $f, \alpha, \beta$  de sorte que la solution exacte soit  $u_e(x) = sin(\pi x)$ . Représenter sur un même graphique la solution exacte et la solution du système discrétisé.

Q-1-5 : Pour les mêmes expressions de  $f, \alpha, \beta$ , ci-dessus, faites varier le pas de discrétisation h = 1/(n+1) de façon dyadique ( $h_i = h \times 2^{-i}, i = 1, 2, 3, 4$ ) et représenter à l'échelle logarithmique, la courbe  $h_i \longmapsto \|u_e - u_{h_i}\|_{\infty}$ , où  $u_{h_i}$  désigne la solution approchée obtenue par différences finies pour le pas  $h_i$ . Déterminer la pente de la droite (approchée) obtenue et déduire l'ordre de la discrétisation par différences finies adoptée.

### Q-2 : Matrice du Laplacien en deux dimensions d'espace

On pose  $\Omega=]0,1[\times]0,1[$ , on se donne deux fonctions f,g continues sur  $\bar{\Omega}$ , et on cherche une fonction  $u\in C^2(\Omega)$  telle que :  $-\Delta u(x,y)=f(x,y)$  dans  $\Omega,\quad u(x,y)=g(x,y)$  sur  $\partial\Omega$ , où  $\Delta u(x,y)=\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial^2 x}+\frac{\partial^2 u(x,y)}{\partial^2 y}$ .

- Q-2-1 : En suivant les étapes de discrétisation par différences finies vues en cours, donner l'expression de la matrice A et le second membre b de la formulation matricielle du problème discret.
- Q-2-2 : Écrire deux fonctions MATLAB de prototype [A] = laplace2D (n, m) et [b] = Smlaplace2D (n, m, f, g) retournant la matrice A et le second membre b obtenue ci-dessus, pour les pas de discrétisation  $h_x = \frac{1}{n+1}, h_y = \frac{1}{m+1}$ . Décrire la matrice obtenue.

### Exercice - 3 Stockage pour les méthodes directes d'inversion de systèmes linéaires

Le but de cet exercice est d'exhiber un stockage de matrice favorable à l'utilisation des méthodes directes d'inversion des systèmes linéaires.

### Q-1 : Matrices bandes (stockage et factorisation)

**Q-1-1**: A l'aide de la commande spy, représenter graphiquement la matrice A de la discrétisation 1D du Laplacien. Représenter aussi les matrices de sa factorisation LU et Cholesky (où on a stocké dans une matrice de même taille que A les factorisations LU et Cholesky).

Comparer les largeurs de bande des différentes matrices et conclure.

Q-1-2 : Écrire une fonction MATLAB de prototype [AA, lbg, lbd, n ] = StockBand (A) qui calcule les demi-largeurs de bande inférieure lbg et supérieure lbd d'une matrice pleine A et la stocke sous forme bande dans un vecteur AA de taille  $(lbg + lbd + 1) \times n$ .

Écrire aussi une fonction MATLAB [A] = Band2full (AA, lbg, lbd, n) qui transforme une matrice stockée sous format bande en une matrice pleine.

**Q-1-3**: Écrire une fonction MATLAB de prototype [AA, lbg, lbd, n, Nop] = decompLUBand (AA, lbg, lbd, n), qui effectue une factorisation LU d'une matrice stockée bande (voir algorithme donné en annexe).

Faites varier l'entier n et générer la matrice du Laplacien 1D. Récupérer les nombres d'opérations donnés par les factorisations decompLUBand et decompLU\_nop (voir script plus haut). Représenter sur un même graphique à l'échelle logarithmique ces nombres d'opérations en fonction de la taille n. Calculer les pentes des droites obtenues et conclure.

- **Q-1-4**: Écrire une fonction MATLAB de prototype [x] = inverseLUBand (AA, lbg, lbd, n, b), qui résout le système linéaire Ax = b pour lequel la matrice A factorisée LU est stockée sous forme bande.
- Q-1-5 : Écrire une fonction MATLAB de prototype [AA, lb, n] = StockBandSym(A) qui calcule la demi-largeur de bande lb d'une matrice pleine symétrique A et stocke sa partie triangulaire inférieure sous forme bande dans un vecteur AA de taille  $(lb+1) \times n$ .
- **Q-1-6** : Écrire une fonction MATLAB de prototype [AA, lb, n] = decompCholBand(AA, lb, n), qui effectue une factorisation Cholesky d'une matrice symétrique stockée bande (*voir algorithme donné en annexe*)

Q-1-7 : Écrire des fonctions MATLAB de prototype [x] = inverseCholBand (AA, lb, n, b), qui résout le système linéaire Ax = b pour lequel la matrice A factorisée Cholesky est stockée sous forme bande.

#### Q-2 : Réduction de largeur de bande des matrices

Cette question a pour but de montrer qu'on peut ramener, via une renumérotation, une matrice donnée avec beaucoup de zéros, en une matrice de faible largeur de bande.

Il est fourni, pour cette question, une fonction [B,p]=rcm (A,i) à travers un fichier rcm.m. Pour son appel, il faut apporter une matrice A pleine de taille n et un indice  $1 \le i \le n$ . On a en retour un vecteur p de permutation de l'ensemble  $\{1, \ldots n\}$ , et une matrice pleine  $B_{ij} = A_{p(i)p(j)}, 1 \le i, j \le n$ .

**Q-2-1**: Tester cette fonction sur certaines matrices (laplace2D (n, n)) en affichant, commande spy, les matrices entrées et sorties. Commenter les observations.

Pour différentes valeurs de n, exécuter A=laplace2D(n,n); [B,p]=rcm(A,1);  $AA=decompLU\_eco(A)$ ;  $BB=decompLU\_eco(B)$ ; length(find(AA)), length(find(BB)). Conclure. (La fonction  $decompLU\_eco$  est celle implémentée plus haut).

**Q-2-2** : Générer pour différentes valeurs de n la matrice du Laplacien en dimension deux. Pour un vecteur b donné de taille n, comparer les temps d'exécution des commandes :

```
- A = laplace2D(n,n); x= Ab;
- A = laplace2D(n,n); [B,p]=rcm(A,i); bb=b(p); y= Bb; x(p)=yy; Conclure.
```

### PARTIE - 3 Méthodes itératives de base

Exercice - 1 Convergence des méthodes Jacobi, Gauss-Seidel et SOR dans un cas non symétrique

On rappelle que les méthodes itératives considérées ici sont définies par :

 $||x_0|$  étant un vecteur initial donné,  $Mx_{k+1} = Nx_k + b$ , où A = M - N.

Elles sont alors entièrement définies par la donnée de M car N=M-A, ce qui conduit à l'itération  $Mx_{k+1}=$  $Mx_k + (b - Ax_k)$ . La table 1 définit les différentes méthodes ; On y a posé

- D la matrice diagonale de  $A: D_{ii} = A_{ii}, D_{ij} = 0$ , si  $i \neq j$ ,
- E la matrice triangulaire inférieure stricte de -A:  $E_{ij} = -A_{ij}$  si  $i < j, E_{ij} = 0$  si  $i \ge j$ .

Méthode	matrice M
Jacobi	D
Gauss-Seidel	D-E
Relaxation (SOR)	$D/\omega - E$

TAB. 1 -

**Q-1**: Rappeler les conditions nécessaires pour la convergence de ces méthodes.

Montrer que si la matrice A est à diagonale strictement dominante  $(|a_{ii}| > \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|)$ , alors cette condition est satisfaite

pour les méthodes Jacobi, Gauss-Seidel, et pour la méthode de relaxation (lorsque  $0<\omega\leq 1$ ) même si la matrice An'est pas hermitienne.

(On essaiera d'évaluer  $\|M^{-1}N\|_{\infty}$ , comme étant  $\sup_{\substack{x \neq 0 \\ My = Nx}} \frac{\|y\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}}$ ) Q-2 : Sans effectuer de calcul, justifier que la méthode de relaxation avec un paramètre  $\omega$  optimal converge toujours

- plus vite que la méthode de Gauss-Seidel.
- Q-3 : Montrer sur un cas particulier que si la méthode de Jacobi et de Gauss-Seidel convergent simultanément, alors la méthode de Gauss-Seidel converge toujours plus vite que la méthode de Jacobi.
- Q-4 : Justifier en se basant sur le cas particulier de la matrice du Laplacien en 1D, pourquoi pour une matrice tridiagonale hermitienne, il vaut mieux sur-relaxer ( $\omega > 1$ ) que sous-relaxer ( $\omega < 1$ ) la relaxation.

On rappelle que pour une matrice tridiagonale, hermitienne, définie positive, le paramètre optimal  $\omega_{opt} = \frac{2}{1+\sqrt{1-\rho(\mathcal{J})^2}}$ , où  $\mathcal{J}$  est la matrice d'itération de la méthode itérative de Jacobi.

Exercice - 2 Programmation des méthodes Jacobi, Gauss-Seidel et SOR

Cet exercice a pour but de programmer et de comparer les méthodes Jacobi, Gauss-Seidel et SOR. Toutes les fonctions auront pour arguments principaux:

- A la matrice du système et b le vecteur second membre,
- x0 est le vecteur initial, tol la valeur  $\varepsilon$  du test d'arrêt et iterMax le nombre maximal d'itérations, et fourniront en retour
- x la solution approchée.
- res un vecteur stockant la valeur de la norme du résidu à chaque itération.

La longueur de res est donc égale au nombre d'itérations effectuées. Il n'y a convergence que si length (res) < itermax ou si length(res) == itermax et res(length(res)) <= tol.</pre>

# **O-1**: Programmation

Q-1-1 : Écrire une fonction MATLAB de prototype [x, res] = Jacobi (A, b, x0, tol, iterMax), qui résout le système linéaire Ax = b selon la méthode Jacobi.

- **Q-1-2** : Écrire une fonction MATLAB de prototype
- [x, res] = GaussSeidel(A,b,x0, tol,iterMax) qui résout le système Ax = b par une méthode de GaussSeidel.
- Q-1-3 : Écrire une fonction MATLAB de prototype [x,res] = sor(A,b,x0, tol,iterMax, w) qui résout le système Ax = b par une méthode de relaxation. Ici, w désigne le paramètre de relaxation.

#### Q-2 : Comparaison

- Q-2-1 : Écrire une fonction [A,b] = laplace2Df (nx,ny) qui retourne la matrice A et le second membre b du problème du Laplacien sur le domaine  $\Omega = ]0,1[\times]0,1[$  avec un second membre f=1 et une condition de Dirichlet homogène sur toute la frontière du domaine (on pourra utiliser les fonctions laplace2D et Smlaplace2D implémentées plus haut
- **Q-2-2**: Pour comparer ces méthodes, on prend tol = 1e-6, le vecteur initial x0 nul, iterMax=1E4 et pour la méthode de relaxation, on prend w = 1.6.

Générer la matrice et le second membre du Laplacien [A,b] = laplace2Df (15,10) et représenter sur un même graphique la courbe du logarithme des normes des résidus retournés par les méthodes Jacobi, Gauss-Seidel et SOR, en fonction du nombre d'itérations. Commenter les observations.

(On pourra utiliser la commande semilogy).

### **Exercice -** 3 Quelques formats de stockage de matrices pour les méthodes itératives

Les méthodes itératives ne nécessitent que les produits matrice-vecteur et la résolution des systèmes dont les matrices sont de formes simples (diagonales ou triangulaires). On peut alors stocker sous forme condensée (sparse) les matrices utilisées.

### Q-1 : Stockage par coordonnées (COO) ou stockage IJV.

Ici on ne stocke que les éléments non nuls de la matrice dans un vecteur VA. Pour chaque élément VA(k), son indice de ligne est donné par IA(k) et son indice de colonne est donné par JA(k). Les vecteurs IA, JA et VA sont donc de même taille.

Q-1-1 : Écrire une fonction MATLAB function [IA, JA, VA] = stockCOO(A) qui réalise le stockage par coordonnées d'une matrice pleine A.

Pour vérifier votre programmation, écrire aussi une fonction function [A] = COO2full (IA, JA, VA) (*lire COO to full*) qui effectue la conversion réciproque.

Q-1-2 : Écrire une fonction MATLAB function [x] = descenteCOO (IA, JA, VA, b) qui résout le système Ax = b où A est une matrice triangulaire inférieure stockée au format coordonnées.

Écrire une fonction MATLAB function [ax] = amultCOO (IA, JA, VA, x) qui effectue le produit matrice vecteur ax = Ax où A est une matrice stockée sous format coordonnées.

## Q-2 : Stockage CSR (en anglais Compressed Sparse Row) ou stockage Morse.

Dans ce format on diminue la taille du vecteur IA du format précédent. Pour cela, VA est créé en parcourant la matrice ligne par ligne de la première à la dernière en stockant au même moment les indices de colonne des éléments de VA dans JA. Le vecteur IA est ici de taille n+1 et est défini de la manière suivante : IA (i) est la position dans VA du premier élément non nul de la ligne i. Une autre interprétation qui justifie la taille n+1 de IA est la suivante : On a IA (1) =1 et IA (i+1) - IA (i) est le nombre d'éléments non nuls de la ligne i ; ainsi IA (n+1) = nnz+1, où nnz est le nombre d'éléments non nuls de la matrice A, c'est à dire la taille de VA.

Q-2-1 : Écrire une fonction MATLAB function [IA, JA, VA] = stockMorse(A) qui réalise le stockage Morse d'une matrice pleine A. Pour vérifier votre programmation, écrire aussi une fonction function [A] = Morse2full(IA, JA, VA) qui effectue la conversion réciproque.

 $\mathbf{Q}$ -2-2 : Écrire une fonction MATLAB function [x] = descenteMorse (IA, JA, VA, b) qui résout le système Ax=b où A est une matrice triangulaire inférieure stockée au format CSR.

vecteur ax = Ax où A est une matrice stockée au format CSR.

Écrire une fonction MATLAB function [ax] = amultMorse (IA, JA, VA, x) qui effectue le produit matrice

# PARTIE - 4 Méthodes itératives de type gradient

Ce TP a pour but de construire les méthodes itératives (du gradient) pour déterminer la solution x du système linéaire Ax = b, où A est une matrice carrée d'ordre n, symétrique définie positive et b un vecteur de taille n. Dans tout ce qui suit, on se trouve dans le cas réel. On désigne par  $(\cdot,\cdot)$  le produit scalaire euclidien (i.e  $(x,y)=\sum_{i=1}^n x_iy_i)$  et  $\|\cdot\|$  la norme associée.

**Exercice -** 1 *Méthode du gradient à pas fixe (ou de Richardson)* 

On considère la fonction f définie de  $\mathbb{R}^n$  dans  $\mathbb{R}$  par  $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$ .

**Q-1**: Montrer que  $x_0$  est solution de Ax = b si et seulement si  $x_0$  minimise la fonction f.

**Q-2** : On considère la méthode itérative :  $||x_0|$  étant un vecteur initial donné,  $x_{k+1} = x_k - \alpha \nabla f(x_k)$ .

- $\mathbf{Q}$ -2-1 : Donner la matrice d'itération B de cette méthode et conclure que cette méthode converge si et seulement si  $0 < \alpha < \frac{2}{\lambda_n}$  où  $0 < \lambda_1 \le \ldots \le \lambda_n$  sont les valeurs propres de la matrice symétrique définie positive A.
  - **Q-2-2** : Montrer que le meilleur choix de  $\alpha$  est :  $\alpha_{opt} = \frac{2}{\lambda_n + \lambda_1}$  et qu'alors  $\varrho(B) = \frac{\lambda_n \lambda_1}{\lambda_n + \lambda_1}$ .
- Q-2-3 : Écrire en pseudo-code l'algorithme de gradient à pas constant, en faisant intervenir le résidu dans les itérations (on rappelle que le résidu à l'itération k est défini par  $r_k = b - Ax_k$ ).
- Q-2-4 : Programmer cet algorithme sous MATLAB à travers une fonction de prototype function [x, res] = Gradient(A, b, x0, tol, iterMax, alpha), où
- A est la matrice du système et b le vecteur second membre,
- x0 est le vecteur initial, tol la valeur  $\varepsilon$  du test d'arrêt et iterMax le nombre maximal d'itérations, alpha désigne le paramètre  $\alpha$ ,
- x est la solution approchée,
- res un vecteur stockant la valeur de la norme du résidu à chaque itération.
- Q-2-5 : On considère la matrice et le second membre du Laplacien A, b générés par la commande [A,b] = laplace2Df(10,10) (voir Parties précédentes).

On fixe iterMax = 10000, tol = 1E-4. Faites varier  $\alpha$  entre 1E-3 et 3 E-3 par pas de 1E-4. Représenter le logarithme du nombre d'itérations en fonction du paramètre  $\alpha$ . Déterminer numériquement la valeur  $\alpha$  conduisant à un nombre d'itérations minimal. Comparer avec la valeur donnée par la théorie.

Exercice - 2 Méthode du gradient à pas variable

**Q-1**: On suppose construite une suite  $(p_0, p_1, \dots, p_k, \dots)$  de vecteurs linéairement indépendants. Et on considère la méthode itérative suivante :

 $x_0$  vecteur initial donné,

 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ . Où  $\alpha_k$  est choisi tel qu'il réalise le minimum de  $f(x_k + \alpha p_k)$ .

**Q-1-1** : Montrer que  $\alpha_k = \frac{(r_k, p_k)}{(Ap_k, p_k)}$ , où  $r_k = b - Ax_k$ , et conclure que  $(r_{k+1}, p_k) = 0, \forall k \geq 0$ .

**Q-1-2** : On pose  $E(x_k) = (A(x_k - x), (x_k - x))$  où x est la solution de Ax = b. Montrer que pour la valeur de  $\alpha_k$  ci-dessus, on a  $E(x_{k+1}) = E(x_k) - \frac{(r_k, p_k)^2}{(Ap_k, p_k)}$ .

**Q-1-3** : En remarquant que 
$$E(x_k) = (A^{-1}r_k, r_k)$$
, montrer que  $E(x_{k+1}) = E(x_k) \left(1 - \frac{(r_k, p_k)^2}{(A^{-1}r_k, r_k)(Ap_k, p_k)}\right)$ .

$$\mathbf{Q}\text{-1-4}\quad\text{:}\quad \text{D\'eduire de la question pr\'ec\'edente que } E(x_{k+1}) \leq E(x_k) \left[1 - \frac{1}{cond(A)} \left(\frac{r_k}{\|r_k\|}, \frac{p_k}{\|p_k\|}\right)^2\right].$$

Où  $cond(A)=\frac{\lambda_n}{\lambda_1}$  désigne le conditionnement de la matrice A. on utilisera le fait que  $(Ay,y)\leq \lambda_n(y,y),\quad (A^{-1}y,y)\leq \frac{1}{\lambda_1}(y,y) \forall y$ . Conclure qu'une condition suffisante de convergence est de choisir les  $p_k$  tels que

 $\forall k \geq 0 \ \left(\frac{r_k}{\|r_k\|}, \frac{p_k}{\|p_k\|}\right) \geq \mu > 0, \text{ où } \mu \text{ est une constante indépendante de } k.$ 

**Q-1-5** : Déduire de la question précédente que  $p_k = r_k, \forall k \geq 0$  est un choix possible assurant la convergence.

: On prend dans cette question  $p_k = r_k \ \forall k \geq 0$ .

Q-2-1 : Écrire l'algorithme ainsi obtenu.

**Q-2-2** : Que devient  $E(x_{k+1})$  de la question 1-c ci-dessus ?

**Q-2-3** : On admet l'inégalité de Kantorovich suivante :  $\frac{(Ay,y)(A^{-1}y,y)}{(y,y)^2} \le \frac{(\lambda_n + \lambda_1)^2}{4\lambda_n \lambda_1} \ \forall y \ne 0...$ Montrer qu'on a alors  $E(x_{k+1}) = E(x_k) \left(\frac{cond(A)-1}{cond(A)+1}\right)^2$ .

**Q-2-4** : Conclure que 
$$||x_k - x|| \le \sqrt{\frac{E(x_0)}{\lambda_1}} \left(\frac{cond(A) - 1}{cond(A) + 1}\right)^k$$
.

Q-2-5 : Programmer cet algorithme sous MATLAB à travers une fonction de prototype function [x, res] = GradientV (A, b, x0, tol, iterMax).(Les arguments sont définis comme à la question 2-d de l'exercice 1.)

### **Exercice -** 3 Méthode du gradient conjugué

Une amélioration de la méthode de gradient à pas variable consiste à choisir les directions  $p_k$  telles que  $x_{k+1}$  réalise le minimum de f sur  $x_0 + [p_0, p_1, \dots p_k]$ , en souhaitant que ce problème de minimisation globale soit égale au problème de minimisation locale :  $\min_{x=x_0+\bar{x}+y,y\in[p_k]} f(x)$ , dans lequel  $\bar{x}\in[p_0,p_1,\dots p_{k-1}]$  est connu et issu d'une précédente minimisation. Les deux premières questions ci-dessous justifient pourquoi on choisit les  $p_k$  A-conjugués.

**Q-1** : Monter que 
$$f(x_0 + \bar{x} + \alpha p_k) = f(x_0 + \bar{x}) + \alpha(p_k, A\bar{x}) + \frac{\alpha^2}{2}(p_k, Ap_k) - \alpha(p_k, r_0)$$
.

Q-2 : Conclure qu'un moyen de découpler le problème de minimisation globale en une succession de problèmes de minimisation locale est de prendre  $(p_k, A\bar{x}) = 0$ , ce qui est équivalent à  $(p_k, Ap_i) = 0$ ,  $\forall 0 \le i \le k-1$ . On dit dans ce cas que les vecteurs  $p_i$ ,  $i = 1 \dots k$  sont A-conjugués.

La méthode du gradient conjugué consiste alors en deux points :

- choisir les directions  $p_k$  A-conjuguées c'est-à-dire  $(Ap_k, p_j) = 0 \ \forall 0 \le j \le k-1$ ,
- $p_0=r_0$ , et prendre  $p_{k+1}$  dans le plan contenant  $r_{k+1}$  et  $p_k$  c'est-à-dire  $p_{k+1}=r_{k+1}+\beta_{k+1}p_k$ . Q-3 : Montrer que les vecteurs  $p_{k+1}$  et  $p_k$  sont A-conjugués si et seulement si  $\beta_{k+1}=-\frac{(r_{k+1},Ap_k)}{(p_k,Ap_k)}$

**Q-4**: En remarquant que  $(r_k, p_{k-1}) = 0 \ \forall k$ , montrer que  $(r_k, p_k) = (r_k, r_k) \ \forall k$ . Simplifier alors l'expression de  $\alpha_k$ .

**Q-5**: En écrivant  $r_k = p_k - \beta_k p_{k-1}$ , montrer que  $(r_{k+1}, r_k) = 0$ . (on utilisera l'expression de  $\beta_k$ ).

**Q-6**: En écrivant  $Ap_{k-1} = \frac{1}{\alpha_{k-1}}(r_{k-1} - r_k)$ , montrer que  $(Ap_{k-1}, r_k) = -\frac{1}{\alpha_{k-1}}(r_k, r_k)$  et  $(Ap_{k-1}, p_{k-1}) = \frac{1}{\alpha_{k-1}}(r_{k-1}, r_{k-1})$ . Simplifier alors l'expression de  $\beta_{k+1}$ .

**Q-7** : Montrer que  $(r_k, r_j) = 0 \ \forall \ 0 \le j \le k-1$ . En déduire qu'en arithmétique exacte, l'algorithme du gradient conjugué converge en au plus n itérations, où n est la taille du système. (On remarquera que si  $r_k \neq 0, \forall 0 \leq k \leq n-1$ , alors  $[r_0, \ldots, r_{n-1}]$  est une base de  $\mathbb{R}^n$ ).

: Écrire l'algorithme du gradient conjugué.

Q-9 : Programmer cet algorithme sous MATLAB à travers une fonction de prototype function [x, res] = GradientC (A, b, x0, tol, iterMax). (Les arguments sont définis comme à la question 2-d de l'exercice 1.)

#### Exercice - 4 Comparaison numérique des méthodes

On considère A et b la matrice et le second membre obtenus par discrétisation par différences finies du Laplacien sur  $[0,1] \times [0,1]$  avec pour second membre f=1 et des conditions aux limites de Dirichlet homogènes. La grille utilisée est définie par  $h_x = \frac{1}{n+1}$ ,  $h_y = \frac{1}{m+1}$ .

Q-1 : Exécuter le script suivant, en vous assurant que les fonctions appelées sont bien accessibles. (Se référer aux précédentes Parties).

```
    Comparaison des méthodes .

clear all;
A = laplace2D(10,10);
f = inline('x-x+1','x','y');
g = inline('x-x+0','x','y');
b = Smlaplace2D(10, 10, f, g);
x0=b; x0(:,1) = 0;
tol = 1e-9;
iterMax = 100000;
disp(' calcul ');
[x, resJ] = Jacobi(A, b, x0, tol, iterMax);
[x,resG]=GaussSeidel(A,b,x0, tol ,iterMax);
[x, resS] = sor(A, b, x0, tol, iterMax, 1.6);
[x,resGradV]=gradientV(A,b,x0, tol ,iterMax);
[x,resGrad]=gradient(A,b,x0, tol ,iterMax,1.);
[x,resGradC]=gradientC(A,b,x0, tol ,iterMax);
disp(' affichage ');
semilogy(1:length(resJ),resJ,'-.r'
          1:length(resG), resG,'--ms',
         1:length(resS), resS,'--s',
          1:length(resGradV), resGradV,':s',
         1:length(resGrad), resGrad, '-b',
         1:length(resGradC),resGradC,'-*r'
legend('Jacobi','Gauss-Seidel','SOR w=1.6','gradient pas variable',
    'gradient pas fixe optimal', 'gradient conjugue');
```

## **Exercice -** 1 Méthode du gradient à pas fixe (ou de Richardson)

Q-1 : On a  $\forall t \in \mathbb{R}, \forall y \in \mathbb{R}^n, \ f(x_0+ty)=f(x_0)+t(Ax_0-b,y)+\frac{t^2}{2}(Ay,y).$  Par conséquent,  $x_0$  minimise f si et seulement si pour tout  $t \in \mathbb{R}$  et  $y \in \mathbb{R}^n$ , on a  $t(Ax_0-b,y)+\frac{t^2}{2}(Ay,y) \geq 0.$  Soit  $t(Ax_0-b,y) \leq -\frac{t^2}{2}(Ay,y) \leq 0.$  Soit encore  $(Ax_0-b,y)=0 \ \forall y \in \mathbb{R}^n$ ; C'est-à-dire  $Ax_0-b=0.$ 

**Q-2**:

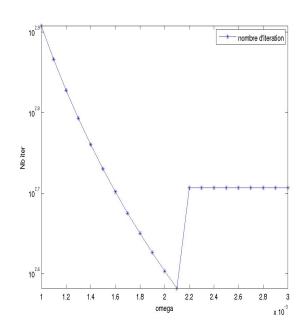
Q-2-1 : voir cours

Q-2-2 : voir cours

**Q-2-3** : Télécharger sur la page web http://www.math.u-psud.fr/ apoung le code MATLAB . *L'accès est soumis à une authentification*.

# Q-2-4 : Idem que précédemment

```
_ script de test du gradient -
clear all;
A = laplace2D(10,10);
f = inline('x-x+1','x','y');
g = inline('x-x+0','x','y');
b = sndmf2D(10, 10, f, g);
w = .001:.0001:.003;
n = length(w);
y=[];
x0=b; x0(:,1) = 0;
tol = 1e-6;
iterMax = 10000;
Niter=[];
disp(' calcul ');
for k=1:n
[x, res] = gradient(A, b, x0, tol , iterMax, w(k));
Niter(k) = length(res);
y=x;
end
l = eig(A);
wop = 2./(min(1) + max(1))
disp(' affichage ');
semilogy(w,Niter,'*-');
xlabel('omega');ylabel('Nb iter');
legend('nombre d''iteration ');pause();
print -djpeg 'gradient.jpg';
```



La valeur approximative est  $\omega_{opt} \approx 0.0021$ . On retrouve la valeur théorique  $\frac{2}{\lambda_1 + \lambda_n}$ 

### Exercice - 2 Méthode du gradient à pas variable

Cet exercice a été entièrement traité en cours.

## Exercice - 3 Méthode du gradient conjugué

**Q-1**: Pour  $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$ , un calcul simple donne:

$$\nabla f(x) = Ax - b, \nabla^2 f(x) = A \text{ et } f(x+h) = f(x) + (\nabla f(x), h) + \frac{1}{2}(\nabla^2 f(x)h, h)$$

D'où 
$$f(x_0 + \bar{x} + \alpha p_k) = f(x_0 + \bar{x}) + \alpha(A\bar{x}, p_k) - \alpha(r_0, p_k) + \frac{\alpha^2}{2}(p_k, Ap_k).$$

Q-2 : De la question précédente il découle que  $f(x_{k+1}) = \min_{y \in [y_0, \dots p_k]} f(y) = \min_{y = x_0 + \bar{x} + \alpha p_k, \bar{x} \in [y_0, \dots p_{k-1}]} f(y)$   $= \min_{\bar{x}} \min_{\alpha} \left[ f(x_0 + \bar{x}) + \alpha(A\bar{x}, p_k) - \alpha(r_0, p_k) + \frac{\alpha^2}{2} (p_k, Ap_k) \right].$ 

Par suite si  $(A\bar{x}, p_k) = 0$  le problème de minimisation global se découple en deux problèmes de minimisation :

$$f(x_{k+1}) = \min_{\bar{x}} f(x_0 + \bar{x}) + \min_{\alpha} \left[ -\alpha(r_0, p_k) + \frac{\alpha^2}{2}(p_k, Ap_k) \right].$$

Le premier nous fournit  $x_k$ , c'est à dire  $f(x_k) = \min_{\bar{x}} f(x_0 + \bar{x})$ , et le second nous donne  $\alpha_k = \frac{(r_0, p_k)}{(Ap_k, p_k)}$ . On peut d'ailleurs déduire une première propriété de la méthode :

En effet, pour la valeur de  $\bar{x}$ , qui réalise le minimum de  $\min_{\bar{x}} f(x_0 + \bar{x})$  et qui permet par la même occasion de déterminer  $x_k$ , le problème de détermination de  $x_{k+1}$  s'écrit :

 $f(x_{k+1}) = \min_{\alpha} f(x_k + \alpha p_k)$ . Or ce problème a une solution donnée par  $\alpha_k = \frac{(r_k, p_k)}{(Ap_k, p_k)}$ 

On en déduit alors en égalant les expressions de  $\alpha_k$  que :

$$(r_0, p_k) = (r_k, p_k) \quad \forall k \ge 0$$

**Q-3**: 
$$0 = (p_{k+1}, Ap_k) = (r_{k+1}, Ap_k) + \beta_{k+1}(p_k, Ap_k) \Longrightarrow \beta_{k+1} = -\frac{(r_{k+1}, p_k)}{(Ap_k, p_k)}$$

**Q-4** :  $r_k = r_{k-1} - \alpha_{k-1} A p_k \Longrightarrow (r_k, p_{k-1}) = (r_{k-1}, p_{k-1}) - \alpha_{k-1} (A p_{k-1}, p_{k-1}) = 0$  par définition de  $\alpha_{k-1}$ . Donc  $(r_k, p_{k-1}) = 0 \quad \forall k \geq 0$ .

Par conséquent, 
$$(r_k, p_k) = (r_k, r_k + \beta_k p_{k-1}) = (r_k, r_k)$$
. D'où  $\alpha_k = \frac{(r_k, p_k)}{(Ap_k, p_k)} = \frac{(r_k, r_k)}{(Ap_k, p_k)}$ 

Q-5 : 
$$(r_{k+1},r_k)=(r_{k+1},p_k-\beta_kp_{k-1})=-\beta_k(r_{k+1},p_{k-1})$$
 d'après 4. Or  $(r_{k+1},p_{k-1})=(r_k-\alpha_kAp_k,p_{k-1})$ . Et ce dernier s'annule par suite de 4. et de la  $A$ -conjugaison. Donc  $(r_{k+1},r_k)=0$   $\forall k\geq 0$ 

**Q-6**: 
$$Ap_k = \frac{1}{\alpha_k}(r_k - r_{k+1})$$
. D'où  $(Ap_k, r_{k+1}) = \frac{1}{\alpha_k}(r_k - r_{k+1}, r_{k+1}) = -\frac{1}{\alpha_k}(r_{k+1}, r_{k+1})$ .  $(Ap_k, p_k) = \frac{1}{\alpha_k}(r_k - r_{k+1}, p_k) = \frac{1}{\alpha_k}(r_k, p_k) = \frac{1}{\alpha_k}(r_k, r_k)$ 

D'où la nouvelle expression de  $egin{aligned} eta_{k+1} = rac{(r_{k+1}, r_{k+1})}{(r_k, r_k)} \end{aligned}.$ 

A ce stade nous avons tous les ingrédients pour écrire l'algorithme du gradient conjugué.

**Q-7** : Montrons néanmoins une seconde propriété qui nous permettra de montrer qu'en arithmétique exacte la méthode du gradient conjugué converge en au plus n itération où n est la dimension du système.

On va montrer que les résidus issus des itérations sont tous orthogonaux.

En effet, on a déjà vu que  $(r_k, r_{k-1}) = 0$ . On initialise ainsi une récurrence. Pour conclure, supposons que  $(r_k, r_l) = 0$ .  $\forall j+1 \leq l \leq k-1$  et montrons alors que  $(r_k, r_j) = 0$ .

En effet, on a  $r_j = r_{j+1} + \alpha_j A p_j$ , et de 5 il vient que  $(r_j, r_k) = \alpha_j (A p_j, r_k)$ . Mais  $r_k = p_k - \beta_k p_{k-1}$ . Par suite de la A-conjugaison, on a  $(A p_j, r_k) = (A p_j, p_k) - \beta_k (A p_j, p_{k-1}) = 0$ . Donc  $(r_k, r_j) = 0 \quad \forall 0 \leq j \leq k-1$ . Par suite si  $r_k \neq 0 \forall 0 \leq k \leq n-1$ , on aura  $r_n = 0$  car  $r_n$  est orthogonal à  $[r_0, \ldots r_{n-1}]$  qui est un espace vectoriel de dimension n car de l'orthogonalité des  $r_k$  la famille  $\{r_0, \ldots, r_k\}$  est libre. Mais  $r_n = b - A x_n$  donc  $r_n = 0 \Rightarrow A x_n = b$ .

Q-8 : L'algorithme du gradient conjugué s'écrit :

```
_ Algorithme du Gradient conjugué -
Algorithme du Gradient Conjugue
Initialisation:
r_0 = b - A x_0
p_0 = r_0 Iteration:
Pour \ k = 1 \dots
                    (r_k, r_k)
       \alpha_k =
                  \overline{(A} p_k, p_k)
                 = x_k + \alpha_k p_k
= r_k - \alpha_k A p_k
      x_{k+1}
      r_{k+1}
       \beta_{k+1} = \frac{(r_{k+1}, r_{k+1})}{(r_{k+1}, r_{k+1})}
                       (r_k, r_k)
     p_{k+1}
                 = r_{k+1} + \beta_{k+1} p_{k-1}
Fin pour k
```

Pour programmer cet algorithme on fait intervenir un test d'arrêt basé sur le résidu  $(\|r_k\| \le \varepsilon \|r_0\|)$  et sur le nombre maximum d'itérations.

```
- Function du gradient conjugué
function [x,res] =gradientC(A,b,x0,tol,iterMax)
% function [x,res] =gradientC(A,b,x0,tol,iterMax)
% fonction qui resoud le systeme Ax=b
% parla methode de Gradient conjugue
% Entree : A -> matrice
         b -> vecteur second membre
         x0 -> vecteur initial
         tol -> parametre epsilon du test d'arret
         iterMax -> nombre maximal d'iterations
% Sortie : x -> solution
         res-> vecteur norme du residu par iteration
% MAO CALCUL SCIENTIFIQUE
% M1 MFA 2008-2009
% J.-B. APOUNG K. Lab AN-EDP Univ d'ORSAY
[n,n]=size(A);
res=[];
%quelques verifications
[n,n]=size(A);
if ((\tilde{n}=length(b)) | (length(b)=length(x0)))
   error('erreur sur les dimensions');
end
% initialisation
x = x0;
r = b - A * x;
p=r;
gamma=r'*r;
iter = 1;
res(iter) = norm(r, 2);
while ( norm(r, 2) > tol && iter < iterMax)
   y = A*p;
   alpha = gamma/(y'*p);
   x = x + alpha*p;
   r = r - alpha*y;
   beta = r'*r / gamma;
   gamma = r' *r;
   p = r + beta * p;
   iter = iter+1;
   res(iter) = norm(r, 2);
```

Résultat de convergence (voir cours) :

```
||x_k - x|| \le 2\sqrt{cond(A)} \left(\frac{\sqrt{cond(A)} - 1}{\sqrt{cond(A)} + 1}\right)^k ||x_0 - x|| \quad for all k \ge 0.
```

L'exécution du code ci-dessous conduit à la figure ci-après.

```
Script de comparaison des méthodes
% script qui compare les differentes methodes
% iteratives
% Indexation des methodes
   1 -> jacobi
  2 -> Gauss-Seidel
  3 \rightarrow sor avec w = 1.6
   4 -> gradient pas variable
   5 -> gradient pas fixe mais parametre optimal
   6 -> gradient conjugue
% MAO CALCUL SCIENTIFIQUE
% M1 MFA
                 2008-2009
% J.-B. APOUNG K. Lab AN-EDP Univ d'ORSAY
clear all;
A = laplace2D(10,10);
f = inline('x-x+1','x','y');
g = inline('x-x+0','x','y');
b = Smlaplace2D(10,10,f,g);
x0=b; x0(:,1) = 0;
tol = 1e-9;
iterMax = 100000;
disp(' calcul ');
[x,resJ]=Jacobi(A,b,x0, tol ,iterMax);
[x, resG] = GaussSeidel(A, b, x0, tol, iterMax);
[x, resS] = sor(A, b, x0, tol, iterMax, 1.6);
[x, resGradV] = gradientV(A, b, x0, tol, iterMax);
[x, resGrad] = gradient(A, b, x0, tol, iterMax, 1.);
[x,resGradC]=gradientC(A,b,x0, tol ,iterMax);
disp(' affichage ');
\verb|semilogy(1:length(resJ),resJ,'-.r',\\
         1:length(resG),resG,'--ms',
         1:length(resS), resS,'--s',
         1:length(resGradV), resGradV,':s',
         1:length(resGrad), resGrad, '-b',
        1:length(resGradC),resGradC,'-*r'
legend('Jacobi','Gauss-Seidel','SOR w=1.6','gradient pas variable',
    'gradient pas fixe optimal','gradient conjugue');
 xlabel('iterations');ylabel('log(norm(residu))');
print -djpeg 'compareiter.jpg'; %% -> ceci permet d'enregistrer le graphique dans un fichier (ici au format jpeg)
```

