Enseirb-Matméca
M2, 2016-2017

Solveurs Linéaires pour les Problèmes Industriels

Fascicule de TD

Exercice 1 : Un peu d'algèbre

1. Soit A une matrice inversible. Montrer que $A^\top A$ est sdp. En déduire que l'application $x \to \sqrt{< A^\top Ax, x >}$ est une norme vectorielle.

Exercice 2 : Méthode de Gauss-Seidel symétrique

La méthode de Gauss-Seidel directe privilégie la partie triangulaire inférieure de A. D'un autre côté, la méthode rétrograde privilégie la partie triangulaire supérieure. Afin de chercher un équilibre, on peut alterner les deux méthodes: c'est le principe de la méthode de Gauss-Seidel symétrique.
Plus précisémment, à partir de x_k, on calcule $x_{k+1/2}$ par la méthode de Gauss-Seidel directe. Puis, on obtient x_{k+1} en appliquant la méthode de Gauss-Seidel rétrograde à partir de $x_{k+1/2}$.

1. Montrer que l'on peut formellement écrire l'itération totale sous la forme:
$$x_{k+1} = Gx_k + M^{-1}b,$$
où G est une matrice à préciser et $M = (D - E)D^{-1}(D - F)$.
2. Montrer que la décomposition LU de M est triviale. En déduire une manière rapide de calculer $M^{-1}b$.
3. Montrer que $G = I - M^{-1}A$. En déduire une manière rapide de calculer Gx_k.
4. En utilisant les questions précédente, écrire l'algorithme de la méthode.

Exercice 3 : Choix de ω pour la relaxation

On considère une méthode de relaxation de paramètre ω (réel).
Calculer le déterminant de la matrice d'itération $M^{-1}N$. En déduire une minoration de $\rho(M^{-1}N)$ qui permet de montrer que la méthode diverge si $\omega \leq 0$ ou $\omega \geq 2$.

Exercice 4 : Convergence de la méthode de relaxation

On suppose que A est à diagonale strictement dominante et que $0 < \omega \leq 1$.

1. Montrer que si λ est une valeur propre de $M^{-1}N$ (où M et N sont les matrices d'une méthode de relaxation directe de paramètre ω) alors $\lambda + \omega - 1$ est une valeur propre de $\omega D^{-1}(F + \lambda E)$.
2. On suppose que $|\lambda| \geq 1$. Majorer $|\lambda + \omega - 1|$ grâce au théorème de Gershgorin.
3. En utilisant le résultat précédent, montrer par l'absurde que la méthode de relaxation de paramètre ω converge.

Exercice 5 : Un exemple

On considère la matrice provenant de la discrétisation par différences finies de ∂_x^2 sur $[0, 1]$ avec conditions de Dirichlet homogène:
$$A = \frac{1}{\Delta x^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

1. Montrer que la méthode de Jacobi utilisée pour résoudre un système $Ax = b$ converge. Indication: calculer les valeurs propres de $M^{-1}N$ en cherchant un vecteur propre associé tel que $x_k = \sin(ik\pi\Delta x)$.

2. En considérant un point quelconque à l'intérieur du maillage, expliquer comment la méthode de Jacobi peut être vue comme une formule de moyenne.

3. Montrer que:

$$\min_i e_i^{k+1} \geq \min_i e_i^k,$$
$$\max_i e_i^{k+1} \leq \max_i e_i^k.$$

Exercice 6 : Gradient à pas constant

La méthode du gradient à pas constant est une méthode de descente pour laquelle la direction de descente est $d_k = -\nabla f(x_k) = r_k$ et le pas de descente α est constant.

1. Donner une condition sur α assurant qu'à chaque étape on a $f(x_{k+1}) < f(x_k)$ (on supposera que A est symétrique).

2. Quels sont les avantages et les inconvénients de cette méthode par rapport au gradient à pas optimal?

Exercice 7 : Erreur du gradient à pas optimal

1. (Résultat préliminaire) Soit A une matrice sdp. On appelle λ_i les valeurs propres de A que l'on supposera ordonnées: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$. On note v_i les vecteurs propres normés associés. Enfin, on exprime l'erreur d'une méthode itérative associée de la manière suivante:

$$e_k = \sum_{j=1}^{n} \xi_j v_j.$$

   Calculer $\|e_k\|^2$, $\|e_k\|_A^2$, $\|r_k\|^2$ et $\|r_k\|_A^2$.

2. On suppose que l'on applique la méthode du gradient à pas optimal. Montrer à l'aide de la question précédente que:

$$\|e_{k+1}\|_A^2 = \omega^2 \|e_k\|_A^2,$$

   avec $\omega^2 = 1 - \dfrac{(\sum_j \xi_j^2 \lambda_j^2)^2}{(\sum_j \xi_j^2 \lambda_j^3)(\sum_j \xi_j^2 \lambda_j)}$.

3. Pour $n = 2$, on note κ le conditionnement de A en norme 2 et $\mu := \xi_2/\xi_1$. Exprimer ω^2 uniquement en fonction de κ et μ.

4. Montrer que ω est maximal pour $\mu = \pm\kappa$.

5. En déduire que $\omega \leq \frac{\kappa-1}{\kappa+1}$ et conclure.

Exercice 8 : Illustration de la convergence du gradient à pas optimal

On considère la matrice $A = \begin{pmatrix} 1/64 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ et le vecteur $b = (4, 0)^\top$.

1. Dessiner quelques lignes de niveau de la forme quadratique $f(x) = \frac{1}{2} < Ax, x > - < b, x >$.

2. Tracer (approximativement) sur un exemple les différentes valeurs de x_k données par la méthode du gradient à pas optimal dans ce cas. Expliquer pourquoi cet algorithme est très mauvais dans ce cas.

3. Que se passerait-il si on utilisait la méthode des directions conjuguées avec les vecteurs de la base canonique? Pourquoi est-ce généralement impossible en pratique?

4. Que se passe-t-il avec la méthode du gradient conjugué?

Exercice 9 : Condition de la méthode des directions conjuguées
On suppose que A est sdp et on considère la méthode des directions conjuguées.

1. Calculer la dérivée de $f(x_{k+1})$ par rapport au pas de descente.
2. En déduire que le minimum de f dans la direction d_k doit vérifier $< r_{k+1}, d_k >= 0$.
3. Vérifier que l'on peut ainsi retrouver l'expression du pas ce la méthode:

$$\alpha_k = \frac{< r_k, d_k >}{< Ad_k, d_k >}.$$

Exercice 10 : Méthode du résidu minimum
La méthode du résidu minimum est une méthode de descente de type gradients dont le pas de descente est choisi pour minimiser la norme du résidu. On supposera que A est définie positive (mais pas forcément symétrique).

1. Calculer $\|r_{k+1}\|^2$ en fonction de $\|r_k\|^2$.
2. En déduire le choix de α_k qui permet de minimiser $\|r_{k+1}\|^2$.
3. Ecrire l'algorithme de la méthode (en évitant les calculs superflus).

Exercice 11 : Convergence des méthodes de gradient
On suppose que A est une matrice sdp dont le conditionnement en norme 2 vaut $\kappa = 1000$. Combien d'itérations des méthodes du gradient à pas optimal et du gradient conjugué sont-elles nécessaires pour que l'erreur décroisse d'un facteur 10^{-6}? Même question si $\kappa = 10^6$. Que peut-on en conclure?

Exercice 12 : Conditionnement
Montrer que:

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

Exercice 13 : Un exemple
On considère la matrice provenant de la discrétisation par différences finies de ∂_x^2 sur $[0,1]$ avec conditions de Dirichlet homogène:

$$A = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

1. Montrer que A est sdp (indication: dans ce cas, on peut simplement utiliser la définition).
2. Calculer les valeurs propres de A. Indice: chercher des vecteurs propres dont la i^e composante est de la forme $a\cos(\omega x_i) + b\sin(\omega x_i)$ avec $x_i = i\Delta x$.
3. En déduire le conditionnement de A en norme 2.
4. Pour résoudre $Ax = b$, on choisit d'utiliser la méthode du gradient à pas optimal. Combien d'itérations sont-elles nécessaires pour que l'erreur décroisse d'un facteur 10^6 si la discrétisation compte 100 points? 1000 points?
5. Même question avec le gradient conjugué.

Exercice 14 : Existence et unicité de la décomposition QR
Soit $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ inversible.

1. Montrer que $A^\top A$ peut se décomposer sous la forme de Cholesky.
2. En utilisant la décomposition de Cholesky de $A^\top A$, montrer que A peut se décomposer sous la forme QR.
3. Montrer que cette décomposition est unique.
4. Que se passe-t-il si $A \in \mathcal{M}_{n,m}(\mathbb{R})$ avec $n > m$ et A de rang maximal?

Exercice 15 : Préconditionnement et symétrie
Soit A une matrice sdp mal conditionnée et M un préconditionneur sdp de A. L'objectif de cet exercice est de mettre en place deux méthodes pour étendre l'algorithme du gradient à pas optimal au problème préconditionné.

1. Expliquer pourquoi on ne peut pas naïvement utiliser l'algorithme du gradient à pas optimal pour résoudre le système préconditionné $M^{-1}Ax = M^{-1}b$.
2. Proposer une première méthode en utilisant la décomposition de Cholesky de M et un préconditionnement à la fois à droite et à gauche.
3. Ecrire l'algorithme correspondant en évitant les calculs superflus.
4. Une deuxième méthode consiste à modifier le produit scalaire.
   (a) Montrer que $(x, y) \mapsto < x, y >_M := < Mx, y >$ est un produit scalaire.
   (b) Montrer que $< M^{-1}Ax, y >_M = < x, M^{-1}Ay >_M$ et donc que $M^{-1}A$ est auto-adjointe au sens du produit scalaire $< ., . >_M$.
   (c) Modifier l'algorithme du gradient conjugué en remplaçant les produits scalaires Euclidiens par des produits scalaires $< ., . >_M$. Appliquer cet algorithme à la résolution du système préconditionné. On pourra poser $z := M^{-1}r$ et on vérifiera que chaque itération ne comporte qu'un produit matrice vecteur faisant intervenir A et que M n'intervient que lors de la mise à jour de z.
   (d) Vérifier que $< M^{-1}Ax, y >_A = < x, M^{-1}Ay >_A$ et que l'on peut donc obtenir une méthode similaire basée sur ce produit scalaire.

Exercice 16 : Méthode de la puissance

1. Faire calculer les 4 premières itérations de la méthode de la puissance (sans renormaliser) pour $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ et $y_0 = (1, 1, 1)^\top$. Comparer les approximations obtenues avec la valeur exacte (*c.f.* exercices précédents).
2. Calculer y_1 et y_2 obtenus par la méthode de la puissance inverse avec $\mu = 7/2$. En déduire la première approximation de λ_1.

Exercice 17 : Méthode de la puissance (2)
On considère la matrice $A = \begin{pmatrix} 99 & 1 \\ 1 & 100 \end{pmatrix}$.

1. Calculer les valeurs propres de A en utilisant le polynôme caractéristique.
2. Effectuer les premières itérations de la méthode de la puissance (sans renormaliser et en utilisant une calculatrice). Expliquer pourquoi la convergence est aussi lente.
3. Pour $\mu \in \mathbb{R}$ donné, montrer qu'on peut retrouver une valeur propre de A en calculant celles de $A - \mu I$.
4. Effectuer les premières itérations de la méthode de la puissance (idem) avec $p = 99$.
5. Même question avec $p = 100$. Expliquer ce qui se passe.

Exercice 18 : Accélération de la convergence de l'itération orthogonale
L'itération orthogonale permet d'obtenir une approximation de toutes les valeurs propres de A. Cependant, chaque itération est coûteuse puisqu'elle nécessite une décomposition QR. On cherche donc à l'améliorer. Une solution consiste à utiliser un décalage ("*shift*") de la manière suivante:
$B_0 \leftarrow A,\ k \leftarrow 1$,
Jusqu'à convergence faire:
  Déterminer le paramètre p_{k-1},
  $Q_k R_k = B_{k-1} - p_{k-1} I$ (décomposition QR),
  $B_k \leftarrow R_k Q_k + p_{k-1} I$,
Fin

1. Montrer que B_k et B_{k-1} sont semblables. En déduire que B_k est semblable à A quels que soient les choix des paramètres p_k.
2. En pratique, on constate que si $p_k = 0$ alors $\frac{(B_{k+1})_{i+1,i}}{(B_k)_{i+1,i}} = \mathcal{O}\Big(\frac{|\lambda_{i+1}|}{|\lambda_i|}\Big)$ et donc que les termes sous-diagonaux convergent vers 0 de la manière suivante: $(B_k)_{i+1,i} = \mathcal{O}\Big(\frac{|\lambda_{i+1}|}{|\lambda_i|}\Big)^k$.
   Quel impact a sur la convergence un choix de la forme $p_k \simeq \lambda_j$?
3. D'après la remarque précédente, quel(s) choix de p_k suggéreriez-vous?

Exercice 19 : Amélioration du coût de l'itération orthogonale
Afin de rendre moins coûteuse l'itération orthogonale, on peut aussi essayer de limiter le coût d'une itération.

1. On suppose que A est une matrice de Hessenberg. Montrer que les matrices B_k produites par l'itération orthogonale sont également des matrices de Hessenberg (semblables à A). Indication: utiliser la méthode de Givens pour faire la décomposition QR.
2. Vérifier que dans le cas où A est une matrice de Hessenberg, une étape de l'itération orthogonale coûte $\mathcal{O}(n^2)$ opérations au lieu de $\mathcal{O}(n^3)$.
3. Proposer une variante de la méthode de Householder qui transforme A en une matrice de Hessenberg H.
4. On note $Q_k^\top$ la k^e transformation de l'algorithme précédent (celle qui annule des termes dans la k^e colonne) et on note $A_k = Q_k^\top A_{k-1} Q_k$ (avec $A_0 := A$). Vérifier que Q_k est orthogonale et que A_k et $Q_k^\top A_{k-1}$ ont le même profil. Cette propriété est-elle vraie dans le cas de l'algorithme de Householder?
5. En déduire que $H := A_{n-2}$ est semblable à A et proposer une variante efficace de l'itération orthogonale basée sur les questions précédentes.