TP Agrégation. Option Calcul Scientifique

Méthodes de résolution de systèmes linéaires.

Problème modèle

Soit $g : [0,1] \to \mathbb{R}$ une fonction continue. On s'intéresse au problème suivant:

$$u''(x) = g(x),\ \forall x \in]0,1[,\ \ u(0) = u(1) = 0.$$

On peut montrer qu'il existe une solution et qu'elle est unique (voir la théorie de l'existence et unicité de solutions pour des problèmes elliptiques dans le livre de Brézis [1]). On souhaite calculer numériquement cette solution. Pour cela, on va utiliser la méthode des *différences finies*. Soit $x_i = ih$, $i = 0..N+1$ et $h = \frac{1}{N+1}$, une subdivision de l'intervalle $[0,1]$: on va approcher la dérivée seconde u au point $x_i, i = 1..N$ par:

$$u''(x_i) \approx \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1})}{h^2}.$$

On obtient donc le problème discrétisé

$$\frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1})}{h^2} \approx g(x_i),\ i = 1..N,$$

avec les conditions aux bords $u(x_0) = u(x_{N+1}) = 0$. En posant $U_i = u(x_i)$, $G_i = g(x_i)$, on s'intéresse alors à la résolution du système linéaire approché $AU = G$, où A est la matrice

$$A = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

Pour obtenir une bonne approximation de la solution, il faut faire tendre la pas de discrétisation vers 0 ce qui augmente la taille du système linéaire à résoudre. La matrice est symétrique définie positive. On se propose de présenter plusieurs méthodes de résolution de ce type de système linéaire.

i) Calculer numériquement le conditionnement de A en fonction de la taille de la matrice.

ii) Soit $C = \mathrm{diag}(A_{ii})$. Calculer le conditionnement de $C^{-\frac{1}{2}}AC^{-\frac{1}{2}}$ en fonction de la taille de la matrice et comparer au conditionnement de A.

Méthode directe

iii) Soit une matrice tridiagonale sous la forme

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 \\ a_2 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & \dots & 0 & a_n & b_n \end{pmatrix}.$$

On peut montrer que la décomposition LU de A est donné par

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_2\frac{\delta_0}{\delta_1} & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_n\frac{\delta_{n-2}}{\delta_{n-1}} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\delta_1}{\delta_0} & c_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{\delta_n}{\delta_{n-1}} \end{pmatrix}.$$

où $\delta_0 = 1$, $\delta_1 = b_1$, $\delta_k = b_k\delta_{k-1} - a_k c_{k-1}\delta_{k-2}$. Programmer une méthode de résolution du système linéaire $Au = b$ basée sur cette factorisation. Calculer le temps de calcul de la solution en fonction de la taille de la matrice. Comparer avec l'estimation a priori donnée pour la résolution via le pivot de Gauss d'un système linéaire plein.
iv) (facultatif) Programmer une méthode de pivot de Gauss pour résoudre un système linéaire quelconque (pivot partiel ou total).

Méthodes indirectes

On peut montrer que U est solution de $AU = G$ si et seulement si U est solution du problème de minimisation:
Trouver $U \in \mathbb{R}^N$ tel que $J(U) = \inf_{V\in\mathbb{R}^N} J(V)$, où J est définie par

$$J(U) = \frac{1}{2}U^t AU - (G, U).\ (M)$$

C'est un problème de minimisation *sans contraintes*: on va étudier dans ce TP les principales méthodes de minimisation sans contraintes: méthodes de gradient, gradient conjugué, relaxation. Le cas de la minimisation *avec contraintes* ne sera pas traité ici.

v) Programmer la méthode du gradient au problème de minimisation (M) et illustrer sa vitesse de convergence: on représentera $\frac{|r_{k+1}|}{|r_k|}$ où $r_k = b - A\,x_k$.

Rappel: x_0 donné, $r_0 = b - A\,x_0$, $\alpha_k = \frac{|r_k|^2}{(A\,r_k, r_k)}$, $x_{k+1} = x_k + \alpha_k\,r_k$.

vi) Programmer la méthode du gradient conjugué et illustrer la vitesse de convergence de la méthode.

Rappel: x_0 donné, $p_0 = r_0 = b - A\,x_0$, on pose $\alpha_k = \frac{|r_k|^2}{(A\,p_k, p_k)}$, $x_{k+1} + \alpha_k\,p_k$, $r_{k+1} = r_k - \alpha_k\,A\,p_k$, $\beta_{k+1} = \frac{|r_{k+1}|^2}{|r_k|^2}$ et $p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1}\,p_k$.

Références

[1] H. Brezis, *Analyse fonctionnelle.*

[2] P.G. Ciarlet, *Introduction à l'analyse numérique matricielle et l'optimisation.*

[3] P. Lascaux, R. Theodor, *Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingnieur, Tomes 1 et 2.*