Université Paris Sud — Département de Mathématiques d'Orsay
Agrégation de mathématiques
Modélisation et calcul scientifique — 21 novembre 2008

Gradient conjugué

1) Laplacien discret à une dimension d'espace
Afin de résoudre de façon approchée le modèle

(1) $$-\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2} = 1\,, \quad 0 < x < 1$$

(2) $$u(0) = u(1) = 0\,,$$

on introduit un entier $n \geq 1$, un pas de discrétisation $h \equiv \frac{1}{n+1}$, une grille $(x_j)_{0 \leq j \leq n+1}$ telle que $x_j = j\,h$ et une inconnue discrète $(u_j)_{0 \leq j \leq n+1}$ qui approche la solution de (1)(2) au point x_j. Afin de prendre en compte la condition limite (2), on pose

(3) $$u_0 = 0\,, \quad u_{n+1} = 0$$

et l'équation (1) est approchée au point x_j par le schéma classique aux différences finies :

(4) $$\frac{1}{h^2}\Big(-u_{j-1} + 2\,u_j - u_{j+1} \Big) = 1\,, \quad 1 \leq j \leq n\,.$$

La résolution du modèle discret (3)(4) conduit à introduire une matrice A d'ordre n, symétrique, définie positive et tridiagonale, un second membre $b \in \mathbb{R}^n$ et à chercher $x \in \mathbb{R}^n$ (avec $x_j \equiv u_j$ si $1 \leq j \leq n$) tel que

(5) $$A\,x = b\,.$$

• L'algorithme du gradient conjugué pour résoudre un système tel que (5) prend la forme qui suit. On commence par une initialisation :

(6) $$x_0 \in \mathbb{R}\,, \quad g_0 = A\,x_0 - b\,, \quad w_0 = g_0\,.$$

Puis pour k entier fixé, on suppose x_k, g_k, w_k donnés dans $\mathbb{R}^n$. On calcule alors x_{k+1}, g_{k+1}, w_{k+1} par les relations suivantes :

(7) $$\rho_k = -\frac{(g_k,\, w_k)}{(w_k,\, A\,w_k)}\,, \quad x_{k+1} = x_k + \rho_k\, w_k$$

(8) $$g_{k+1} = A\,x_{k+1} - b$$

(9) $$\alpha_{k+1} = \frac{||\,g_{k+1}\,||^2}{||\,g_k\,||^2}\,, \quad w_{k+1} = g_{k+1} + \alpha_{k+1}\, w_k\,.$$

• Mettre en œuvre l'algorithme du gradient conjugué pour le système linéaire introduit ci-dessus. Interpréter la solution $(u_j)_{0 \leq j \leq n+1}$ ainsi calculée.

2) Préconditionnement

Soit S une matrice symétrique définie positive telle que le système linéaire

(10) $\qquad S\,x \,=\, \beta$

est "facile" à résoudre quel que soit le second membre β. L'algorithme du gradient conjugué préconditionné est une variante des relations (6) à (9) :

(11) $\qquad x_0 \in \mathbb{R}\,, \quad g_0 = A\,x_0 - b\,, \quad w_0 = S^{-1}\,g_0\,.$

(12) $\qquad \rho_k \,=\, -\dfrac{(g_k,\, w_k)}{(w_k,\, A\,w_k)}\,, \quad x_{k+1} \,=\, x_k + \rho_k\, w_k$

(13) $\qquad g_{k+1} = A\,x_{k+1} - b$

(14) $\qquad \alpha_{k+1} \,=\, \dfrac{(g_{k+1},\, S^{-1}\,g_{k+1})}{(g_k,\, S^{-1}\,g_k)}\,, \quad w_{k+1} \,=\, S^{-1}\,g_{k+1} + \alpha_{k+1}\,w_k\,.$

• Mettre en œuvre l'algorithme du gradient conjugué préconditionné si A est la matrice introduite à la première question et S sa diagonale.

3) Laplacien discret à deux dimensions

On remplace l'intervalle $]0,\,1[$ par le carré $\Omega\,=]0,\,1[\times]0,\,1[$, le problème (1)(2) par

(15) $\qquad -\,\Delta u \,=\, 1 \quad \text{dans} \quad \Omega$

(16) $\qquad u \,=\, 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega\,.$

On introduit une grille bidimensionnelle $(x_j,\, y_j) = (i\,h,\, j\,h)$, avec $0 \leq i,\, j \leq n+1$ et une inconnue discrète $(u_{ij})_{0 \leq i,\, j \leq n+1}$. Combien de scalaires u_{ij} sont inconnus ? On remplace les relations (4) par

(17) $\qquad \dfrac{1}{h^2}\Big(-u_{i-1,\,j} - u_{i,\,j-1} + 4\,u_{i,\,j} - u_{i,\,j+1} - u_{i+1,\,j}\Big) \,=\, 1\,, \quad 1 \leq i,\, j \leq n\,,$

ce qui permet de définir une matrice A dite "matrice pentadiagonale pour le Laplacien à deux dimensions d'espace".

• Résoudre le système (17) associé aux conditions aux limites (16) par la méthode du gradient conjugué.

4) Préconditionnement monodimensionnel

Toutes choses égales par ailleurs, on pose

(18) $\qquad \big(S\,u\big)_{ij} \,=\, \dfrac{1}{h^2}\Big(-\,u_{i-1,\,j} + 4\,u_{i,\,j} - u_{i+1,\,j}\Big)\,, \quad 1 \leq i,\, j \leq n\,.$

Utiliser cette matrice comme préconditionneur pour résoudre le système (17) par la méthode du gradient conjugué avec préconditionnement.

FD, 18 novembre 2008.