I Vade-Mecum

Règles : Les travaux sont effectués en binôme : un travail copié ou effectué en collaboration entre N binômes divise les notes des binômes concernés par N.
Cette deuxième partie du projet se déroule sur 3h30, de 14h à 17h30. Le rapport et les codes sources devront être envoyés par mail (ou rendu sur papier pour les rapports manuscrits) **avant 17h30**.

Objectif et contenu : Le projet consiste en la résolution mathématique d'un problème et sa mise en oeuvre informatique. Le **rapport** devra donc d'une part répondre aux questions théoriques posés dans l'énoncé et d'autre part expliquer les choix d'implémentation. Ce deuxième point nécessite tout d'abord la description précise des fonctions implémentées (les types des arguments et les propriétés mathématiques qu'ils doivent vérifier, la définition mathématique de la sortie, la description du fonctionnement de l'algorithme, ...). Ensuite, les résultats obtenus dans les applications numériques devront être vérifiés, analysés et commentés.
Les **codes sources (fichiers sci et sce)** seront réalisés de manière modulaire, les variables auront des noms explicites, ou au moins univoque. On vérifiera qu'ils sont compilables et que les sorties obtenues à partir d'un historique vide sont celles attendues.
NB : Il est recommandé de lire intégralement l'énoncé en premier lieu.

II Epitome

On introduit la méthode du gradient conjugué qui permet de résoudre numériquement, de manière équivalente, un problème d'optimisation et un système linéaire pour une matrice symétrique définie positive. Cet algorithme se base sur la résolution du problème d'optimisation. On applique alors cet algorithme à un exemple classique de matrice que l'on retrouve en analyse numérique.
Dans tout l'énoncé, les vecteurs de $\mathbb{R}^n$ sont des vecteurs colonnes.

III Préliminaires

Soit $n \in \mathbb{N}^*$, $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ symétrique définie positive, $b \in \mathbb{R}^n$. On note $(.,.)$ le produit scalaire euclidien : si x et y sont deux vecteurs de $\mathbb{R}^n$, $(x,y) = {}^t x y$, et $\|.\|_2$ sa norme associée. On considère la fonction suivante :

$$J(x) = \frac{1}{2}(Ax,x) - (b,x), \ \forall \ x \in \mathbb{R}^n.$$

1. Montrer qu'il existe $x^* \in \mathbb{R}^n$ tel que
$$J(x^*) = \inf_{x \in \mathbb{R}^n} J(x) \tag{1}$$
(utiliser les propriétés des matrices symétriques définies positives).
2. Calculer la différentielle de J en un $x \in \mathbb{R}^n$ (calcul de $\mathrm{d}J(x)(h)$, $\forall h \in \mathbb{R}^n$).
3. Montrer que $\mathrm{d}J(x^*) = 0$, *i.e.* que pour tout $h \in \mathbb{R}^n$, $\mathrm{d}J(x^*)(h) = 0$. En déduire que $Ax^* = b$.
4. En utilisant les questions précédentes, montrer que le problème (1) admet une unique solution.

IV Méthode du gradient conjugué

L'algorithme se base sur des propriétés d'algèbre linéaire, plus précisément de vecteurs conjugués à la matrice A (d'où son nom). On ne demande pas de résultats théoriques dans cette section. Un algorithme possible pour la méthode du gradient conjugué est le suivant :

Soient $x_0 \in \mathbb{R}^n$, $r_0 = Ax_0 - b$, $p_0 = -r_0$.
while $r_k \neq 0$ **do**
  $\alpha_k = -\frac{(r_k,p_k)}{(Ap_k,p_k)}$
  $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
  $r_{k+1} = r_k + \alpha_k A p_k$
  $\beta_{k+1} = \frac{(r_{k+1},r_{k+1})}{(r_k,r_k)}$
  $p_{k+1} = -r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$
end while
le résultat de l'algorithme est dans x_{k+1}.

Implémenter cet algorithme et le tester sur le système d'ordre 3 $Ax = b$ suivant :

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad b = (-1, 0, -1).$$

Combien d'itérations a-t-il fallu ?

V Conditionnement

Soit $\|.\|_2$ la norme euclidienne sur $\mathbb{R}^n$, $|||.|||_2$ sa norme subordonnée. Si $A \in \mathcal{G}l_n(\mathbb{R})$, le conditionnement de A pour la norme euclidienne est $\mathrm{cond}_2(A) = |||A|||_2 . |||A^{-1}|||_2$. Soit $\mathfrak{S}(A)$ le spectre de A (*i.e.* l'ensemble des valeurs propres de A). On rappelle que si A est de plus symétrique, $\mathrm{cond}_2(A) = \frac{\max_{\lambda \in \mathfrak{S}(A)} |\lambda|}{\min_{\lambda \in \mathfrak{S}(A)} |\lambda|}$.
On considère la matrice $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ suivante

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix},$$

et on admet qu'elle est symétrique définie positive.

1. Soit $k \in \{1, \ldots, n\}$ et $v_k \in \mathbb{R}^n$ dont la composante j vaut $v_k(j) = e^{\frac{i\pi jk}{n+1}} - e^{-\frac{i\pi jk}{n+1}}$. Montrer que c'est un vecteur propre de A associé à la valeur propre $\lambda_k = 2 - e^{\frac{i\pi j}{n+1}} - e^{-\frac{i\pi j}{n+1}}$.
2. En déduire que $\mathrm{cond}_2(A) = \frac{1+\cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right)}{1-\cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right)}$, puis un équivalent de $\mathrm{cond}_2(A)$ quand $n \to +\infty$. Que peut-on en déduire sur la matrice A quand n est grand ?

3. Tracer dans une même fenêtre les deux courbes $n \mapsto \mathrm{cond}_2(A)$ (trouvé dans la question précédente) et $n \mapsto \mathbf{cond}(\mathbf{A})$, où $\mathbf{cond}(\mathbf{A})$ est le conditionnement de A calculé par la fonction Scilab, et ceci pour $n \in \{1, \ldots, 100\}$. Tracer dans une autre fenêtre l'erreur relative entre ces deux valeurs pour $n \in \{1, \ldots, 100\}$.
4. On se fixe n et on considère $x = (1, \ldots, 1) \in \mathbb{R}^n$, $b = Ax$ et $\tilde{x}$ le vecteur calculé par la méthode du gradient conjugué. Tracer la courbe de l'erreur relative entre x et $\tilde{x}$ pour $n \in \{1, \ldots, 100\}$. Que peut-on en conclure ?