



Université Gaston Berger de Saint-Louis

Résolution numérique de systèmes linéaires
Calcul des valeurs propres et vecteurs propres

Pr. Ousmane THIARE

www.ousmanethiare.com

April 16, 2020

Contenu

Généralités, outils matriciels

- Matrices de Householder
- Quotients de Rayleigh
- Conditionnement d'un problème de valeurs propres

Décompositions

- Décomposition QR
- Tridiagonalisation d'une matrice symétrique

Algorithmes pour le calcul de toutes les valeurs propres d'une matrice

- Méthode de Jacobi
- Méthode de Givens ou bisection

Méthode de la puissance itérée

Contenu

Généralités, outils matriciels

- Matrices de Householder

- Quotients de Rayleigh

- Conditionnement d'un problème de valeurs propres

Décompositions

Algorithmes pour le calcul de toutes les valeurs propres d'une matrice

Méthode de la puissance itérée

Matrices de Householder

Pour tout vecteur v de $\mathbb{C}^n - 0$, on introduit la matrice de Householder $H(v)$ définie par

$$H(v) = I - 2 \frac{vv^*}{v^*v}$$

$H(v)$ est la matrice de la symétrie orthogonale par rapport à l'hyperplan de \mathbb{C}^n orthogonal à v . La matrice $H(v)$ est hermitienne et unitaire. Par abus de langage, on considèrera l'identité comme une matrice de Householder, et l'on écrira $I=H(0)$.

Lemme 5.1

Pour tout x dans \mathbb{C}^n , on a $(x - H(v)x)^*(x + H(v)x) = 0$.

Matrices de Householder

Lemme 5.2

Soient x et y deux vecteurs linéairement indépendants. Si v est un vecteur de $\mathbb{C}^n - 0$, et ω un nombre complexe de module 1 tels que $\omega y = H(v)x$, alors il existe un nombre complexe λ tel que

$$v = \lambda(x - \omega y) \text{ et } \bar{\omega}y^*x = \omega x^*y$$

On en déduit :

Proposition 5.1

Pour tout couple (x, y) dans \mathbb{C}^n tel que $\|x\|_2 = \|y\|_2$, il existe une matrice de Householder $H(v)$ et un nombre complexe ω de module 1 tels que

$$H(v)x = \omega y$$

Matrices de Householder

D'après les lemmes on a $v = \lambda(x - \omega y)$ et $\omega = \pm e^{i\theta}$ où θ est l'argument de $\psi^* x$. v étant défini à une constante multiplicative près, on peut le choisir de sorte que $\|v\|_2 = 1$. De plus le choix pratique du signe dans ω est gouverné par des considérations de conditionnement. On choisira ω tel que $\|x - \omega y\|^2$ est maximal.

Contenu

Généralités, outils matriciels

- Matrices de Householder

- Quotients de Rayleigh

- Conditionnement d'un problème de valeurs propres

Décompositions

Algorithmes pour le calcul de toutes les valeurs propres d'une matrice

Méthode de la puissance itérée

Quotients de Rayleigh

Définition 5.1

Soit A une matrice hermitienne de dimension n . Pour $x \neq 0$, on pose

$$r_A(x) = \frac{x^* Ax}{x^* x}$$

r_A est appelé le quotient de Rayleigh associé à A .

On ordonne les valeurs propres de A par ordre décroissant
 $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n$.

Théorème 5.1

On a

$$\lambda_n = \inf_{x \neq 0} r_A(x), \quad \lambda_1 = \sup_{x \neq 0} r_A(x)$$

$$\lambda_k = \sup_{\dim V=k} \inf_{x \in V, x \neq 0} r_A(x), \quad \lambda_k = \inf_{\dim W=n-k+1} \inf_{x \in W, x \neq 0} r_A(x), \quad 1 \leq k \leq n$$

Contenu

Généralités, outils matriciels

- Matrices de Householder

- Quotients de Rayleigh

- Conditionnement d'un problème de valeurs propres

Décompositions

Algorithmes pour le calcul de toutes les valeurs propres d'une matrice

Méthode de la puissance itérée

Quotients de Rayleigh

Théorème 5.2

Soient A et A' deux matrices hermitiennes, et $E=A'-A$. On note λ_i et λ'_i les valeurs propres de A et A' , μ_i les valeurs propres de E , toutes ordonnées dans l'ordre décroissant. On a alors pour $1 \leq k \leq n$,

$$\lambda_i + \mu_n \leq \lambda'_i \leq \lambda_i + \mu_1$$

$$|\lambda'_i - \lambda_i| \leq \|E\| \text{ pour toute norme matricielle}$$

Contenu

Généralités, outils matriciels

Décompositions

- Décomposition QR

- Tridiagonalisation d'une matrice symétrique

Algorithmes pour le calcul de toutes les valeurs propres d'une matrice

Méthode de la puissance itérée

Décomposition QR

Théorème 5.3

Soit $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ (resp. $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$). Alors il existe une matrice Q unitaire (resp. orthogonale) et une matrice R triangulaire supérieure telles que $A=QR$. De plus on peut assurer que $R_{ii} \geq 0$. Si A est inversible, la décomposition avec $R_{ii} > 0$ est unique.

Lien avec la décomposition de Gram-Schmidt Notons a_j les colonnes de A , q^j les colonnes de Q . Q est unitaire si et seulement si les q^j forment une base orthonormée, et

$$A = QR \iff \forall j, a^j = \sum_{1 \leq l \leq j} R_{lj} q^l$$

Décomposition QR

ce qui se réécrit

$$\begin{aligned}
 a^1 &= R_{1,1}q^1 \\
 &\vdots \\
 a^j &= R_{j,j}q^j + R_{j-1,j}q^{j-1} + \dots + R_{1,j}q^1 \\
 &\vdots \\
 a^n &= R_{n,n}q^n + R_{n-1,n}q^{n-1} + \dots + R_{1,n}q^1
 \end{aligned}$$

Si A est inversible, le système de ses vecteurs colonnes est un système libre, et on sait qu'on peut construire un système orthonormal par le procédé de Gram-Schmidt : supposons connus q^1, \dots, q^{j-1} , et les coefficients $R^{k,i}$ pour $1 \leq i \leq j-1$ et $k \leq i$. On calcule alors à la ligne j les coefficients $R_{k,j}$ par

$$R_{j,j}q_j = a_j - R_{j-1,j}q^{j-1} - \dots - R_{1,j}q^1$$

Décomposition QR

On écrit $(q^j, q^k) = 0$, ce qui donne $(a^j, q^k) - R_{k,j} = 0$ pour $k < j$, puis $(q^j, q^j) = 1$ ce qui donne $R_{j,j} = (a^j, q^j)$ ou encore

$$R_{j,j} = \|a^j\|_2^2 - \sum_{k < j} (a^j, q^k)^2$$

On peut compter le nombre d'opérations nécessité par ce procédé. On a $2n^3$ opérations élémentaires + n extractions de racines carrées. De plus ce procédé est peu stable numériquement. On préfère utiliser les matrices de Householder.

D'après la proposition 5.1, il existe une matrice de Householder $H(v^{(1)})$ et un nombre complexe ω_1 de module 1 tels que

$$H(v^{(1)})a^1 = \omega_1 \|a^1\| e_1$$

Décomposition QR

On note $H^{(1)} = H(v^{(1)})$. La première colonne de la matrice $A^{(2)} = H^{(1)}A$ est donc de la forme ${}^t(r_{1,1}, 0, \dots, 0)$. Par récurrence, on construit une suite de matrices $A^{(k)}$ de la forme

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} r_{1,1} & \cdots & r_{1,k-1} & a_{1,k}^{(k)} & \cdots & a_{1,n}^{(k)} \\ 0_L & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & r_{k-1,k-1} & a_{k-1,k}^{(k)} & & a_{k-1,n}^{(k)} \\ & & & a_{k,k}^{(k)} & \cdots & a_{k,n}^{(k)} \\ & 0 & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{n,k}^{(k)} & & a_{n,n}^{(k)} \end{pmatrix}$$

et une suite de matrices de Householder $H^{(k)} = H(v^{(k)})$, telles que

$$A^{(k+1)} = H^{(k)}A^{(k)}, k = 1, \dots, n.$$

Décomposition QR

On cherche $v^{(k)}$ sous la forme ${}^t v^{(k)} = (0, {}^t \tilde{v}^{(k)})$, et l'on vérifie que

$$H^{(k)} = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & \tilde{H}^{(k)} \end{pmatrix}, \text{ avec } \tilde{H}^{(k)} = I_{n-k+1} - 2\tilde{v}^{(k)} {}^t \tilde{v}^{(k)}$$

On a donc

$$A^{(n)} = H^{(n-1)} \dots H^{(1)} A$$

et la matrice $A^{(n)}$ est triangulaire supérieure. Si l'on pose ${}^t Q = H^{(n-1)} \dots H^{(1)}$, Q est une matrice orthogonale et $A = {}^t Q^{-1} A^{(n)} = Q A^{(n)}$. On a ainsi construit les matrices Q et R .

Décomposition QR

Remarque 5.1

1. Si A est réelle, les $H^{(k)}$ sont réelles, avec $\omega_k = \pm 1$, Q et R sont réelles, et Q est orthogonale.
2. Le nombre d'opérations nécessaires pour calculer Q et R est de l'ordre de $\frac{4}{3}n^3 + n$ racines carrées. De plus cette méthode est beaucoup plus stable que le procédé de Gram-Schmidt.
3. Par contre ce n'est pas une méthode compétitive pour résoudre un système linéaire.

Contenu

Généralités, outils matriciels

Décompositions

- Décomposition QR

- Tridiagonalisation d'une matrice symétrique

Algorithmes pour le calcul de toutes les valeurs propres d'une matrice

Méthode de la puissance itérée

Tridiagonalisation d'une matrice symétrique

Théorème 5.4

Soit $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ symétrique. Alors il existe une matrice P orthogonale telle que tPAP soit tridiagonale.

La démonstration est du même type que pour la méthode QR. Ici on multiplie à droite et à gauche par une matrice de Householder.

Contenu

Généralités, outils matriciels

Décompositions

Algorithmes pour le calcul de toutes les valeurs propres d'une matrice

- Méthode de Jacobi

- Méthode de Givens ou bisection

Méthode de la puissance itérée

Méthode de Jacobi

Soit A une matrice réelle symétrique. On sait qu'il existe une matrice orthogonale O telle que ${}^t O A O$ soit diagonale.

$${}^t O A O = \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 0 & \\ & & & \ddots \\ & & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

La méthode de Jacobi consiste à construire une suite de matrices de rotation $O^{(k)}$ telles que la suite définie par $A^{(k+1)} = {}^t O^{(k)} A^{(k)} O^{(k)}$ converge vers Λ . Soit R_θ^{pq} la matrice de rotation dans le plan (e_p, e_q) d'angle θ :

Méthode de Jacobi

$$R_{p,q}(\theta) = \begin{matrix} & & \mathbf{p} & & & & \mathbf{q} & & & & \\ & & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & & & & \\ & & \vdots & & & & \vdots & & & & \\ \mathbf{p} & & 0 & \dots & 0 & \cos(\theta) & 0 & \dots & 0 & \sin(\theta) & 0 & \dots & 0 \\ & & 0 & & & 0 & 1 & & & 0 & & & \\ & & \vdots & & & \vdots & & \dots & & \vdots & & & \\ \mathbf{q} & & & & & -\sin(\theta) & 0 & \dots & 0 & \cos(\theta) & & & \\ & & & & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & & & & \dots & \\ & & & & & & & & & & & & 1 \end{matrix}$$

On pose $B = {}^t R_{p,q}(\theta) A R_{p,q}(\theta)$. Les $b_{i,j}$ sont alors donnés par

$$\begin{aligned} b_{i,j} &= a_{i,j}, & i \neq p, q, j \neq p, q \\ b_{p,j} &= a_{p,j} \cos(\theta) - a_{q,j} \sin(\theta), & j \neq p, q \\ b_{q,j} &= a_{p,j} \sin(\theta) + a_{q,j} \cos(\theta), & j \neq p, q \\ b_{p,p} &= a_{p,p} \cos^2(\theta) + a_{q,q} \sin^2(\theta) - a_{p,q} \sin(2\theta) \\ b_{q,q} &= a_{p,p} \sin^2(\theta) + a_{q,q} \cos^2(\theta) + a_{p,q} \sin(2\theta) \\ b_{p,q} &= a_{p,q} \cos(2\theta) + \frac{a_{p,p} - a_{q,q}}{2} \sin(2\theta) \\ b_{p,q} &= b_{q,p}. \end{aligned}$$

Méthode de Jacobi

Théorème 5.5

Si $a_{p,q} \neq 0$, il existe un unique θ dans $] -\frac{\pi}{4}, 0[\cup]0, \frac{\pi}{4}[$ tel que $b_{p,q} = 0$.
C'est l'unique racine de l'équation:

$$\cotg 2\theta = \frac{a_{q,q} - a_{p,p}}{2a_{p,q}}$$

Etape 1. On choisit p_1 et q_1 tels que $|a_{p_1,q_1}| = \max_{i \neq j} |a_{i,j}|$. On choisit θ_1 tel que $A^{(1)} = {}^t R_{p_1,q_1}(\theta_1) A R_{p_1,q_1}(\theta_1)$ vérifie $a_{p_1,q_1} = 0$.

Etape 2. On choisit p_2 et q_2 tels que $|a_{p_2,q_2}^{(1)}| = \max_{i \neq j} |a_{i,j}^{(1)}|$. On choisit θ_2 tel que $A^{(2)} = {}^t R_{p_2,q_2}(\theta_2) A^{(1)} R_{p_2,q_2}(\theta_2)$ vérifie $a_{p_2,q_2}^{(2)} = 0$. Puisque $p_2 \neq p_1, q_1, q_2 \neq p_1, q_1$, on a aussi $a_{p_1,q_1}^{(2)} = 0$.

Méthode de Jacobi

Etape k. On choisit p_k et q_k tels que $|a_{p_k, q_k}^{(k-1)}| = \max_{i \neq j} |a_{i, j}^{(k-1)}|$. On choisit θ_k tel que $A^{(k)} = {}^t R_{p_k, q_k}(\theta_k) A^{(k-1)} R_{p_k, q_k}(\theta_k)$ vérifie $a_{p_k, q_k}^{(k)} = 0$. On a $a_{p_1, q_1}^{(k)} = \dots = a_{p_k, q_k}^{(k)} = 0$.
On vide ainsi la matrice de tous ses éléments extradiagonaux.

Théorème 5.6

Chaque élément diagonal $a_{i, i}^{(k)}$ converge vers une valeur propre de A quand k tend vers $+\infty$.

On a à l'étape k ,

$$A^{(k)} = {}^t R_{p_k, q_k}(\theta_k) \cdots {}^t R_{p_1, q_1}(\theta_1) A R_{p_1, q_1}(\theta_1) \cdots R_{p_k, q_k}(\theta_k) = {}^t O^{(k)} A O^{(k)},$$
 où $O^{(k)}$ est une matrice orthogonale. Lorsque k tend vers l'infini, $O^{(k)}$ tend donc vers la matrice des vecteurs propres de A . Pour calculer les vecteurs propres de A , il suffit donc de calculer les matrices $O^{(k)}$, ce qui est néanmoins assez coûteux.

Contenu

Généralités, outils matriciels

Décompositions

Algorithmes pour le calcul de toutes les valeurs propres d'une matrice

- Méthode de Jacobi

- Méthode de Givens ou bisection

Méthode de la puissance itérée

Méthode de Givens ou bisection

Soit A une matrice symétrique réelle. La méthode de bisection permet de calculer toutes les valeurs propres de A . Le principe est le suivant.

Etape 1. On se ramène à une matrice symétrique tridiagonale réelle par la méthode de Householder. La matrice

$$B = \begin{pmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \cdots & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & b_3 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b_n \\ 0 & \cdots & 0 & b_n & a_n \end{pmatrix}$$

a les mêmes valeurs propres que A .

Méthode de Givens ou bisection

Etape 2. On calcule les valeurs propres de B.

L'étape 1 a déjà été décrite, passons à l'étape 2. On suppose d'abord tous les c_i non nuls, sinon on décompose B par blocs qui ont les mêmes valeurs propres. On note p_i le polynôme caractéristique de la matrice A_i définie pour $i \geq 1$ par

$$A_1 = (a_1), A_2 = \begin{pmatrix} a_1 & b_2 \\ b_2 & a_2 \end{pmatrix}, \dots, A_i = \begin{pmatrix} a_1 & b_2 & 0 & \dots & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & b_3 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & b_i \\ 0 & \dots & 0 & b_i & a_i \end{pmatrix}, \dots$$

On posera par convention $p_0 \equiv 1$. On a la relation de récurrence

$$p_i(\lambda) = (a_i - \lambda)p_{i-1}(\lambda) - b_i^2 p_{i-2}(\lambda)$$

Méthode de Givens ou bisection

Etape 2. On calcule les valeurs propres de B.

Lemme 5.3

Les polynômes p_i ont les propriétés suivantes :

1. $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} p_i(\lambda) = \infty, 1 \leq i \leq n$
2. $p_i(\lambda_0) = 0 \Rightarrow p_{i-1}(\lambda_0)p_{i+1}(\lambda_0) < 0, 1 \leq i \leq n - 1$
3. Le polynôme p_i possède i racines réelles distinctes, qui séparent les $(i+1)$ racines du polynôme $p_{i+1}, 1 \leq i \leq n - 1$.

Théorème 5.7

Soit $\omega(\lambda)$ le nombre de changements de signe de l'ensemble $\{p_0(\lambda), \dots, p_n(\lambda)\}$. Alors p_n possède $\omega(b) - \omega(a)$ racines dans l'intervalle $[a, b[$.

Méthode de Givens ou bisection

La méthode consiste alors en deux étapes.

Etape 1. On cherche un intervalle $[a, b]$ qui contient toutes les valeurs propres. On a alors $\omega(a) = 0, \omega(b) = n$.

Etape 2. On applique une méthode de dichotomie. On calcule $\omega(\frac{a+b}{2})$, ce qui détermine le nombre de racines dans les intervalles $[a, \frac{a+b}{2}[$ et $[b, \frac{a+b}{2}[$. On itère.

Méthode de la puissance itérée

Elle permet le calcul de la valeur propre de plus grand module et d'un vecteur propre associé.

On choisit $q^{(0)} \in \mathbb{C}_n$ tel que $\|q^{(0)}\| = 1$.

Pour $k = 1, 2, \dots$, on calcule:

$$\begin{cases} x^{(k)} &= Aq^{(k-1)} \\ \lambda_j^{(k)} &= \frac{x_j^{(k)}}{q_{j-1}^{(k)}} \\ q^{(k)} &= \frac{x^{(k)}}{\|x^{(k)}\|} \end{cases}$$

On fera l'hypothèse suivante :

(H) la valeur propre de plus grand module est unique.

On suppose que A est diagonalisable, et on note V l'espace propre associé à λ_1 .

Méthode de la puissance itérée

Théorème 5.8

On suppose que A est diagonalisable et que l'hypothèse (H) est vérifiée. On suppose de plus que q_0 n'est pas orthogonal à V . Alors on a

1. $\lim_{k \rightarrow \infty} \|A^k q_0\|_2 = |\lambda_1|^k$
2. $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{(A^k q_0)_j}{\|A^k q_0\|_2} = \frac{\lambda_1^k}{|\lambda_1|^k} v_j$, $1 \leq j \leq n$, si $(q_0)_j \neq 0$
3. $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{A^k q_0}{\|A^k q_0\|_2}$ est un vecteur propre associé à λ_1

On remarque que q_k est également défini par $q_k = \frac{A^k q_0}{\|A^k q_0\|_2}$

La méthode de la puissance inverse permet de calculer la plus petite valeur propre en module de A en appliquant la méthode de la puissance à A^{-1} .