Université Gaston Berger de Saint-Louis

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

Pr. Ousmane THIARE

www.ousmanethiare.com

May 10, 2024

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

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

r_A est appelé le quotient de Rayleigh associé à A.

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

Théorème 5.1

On a

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

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

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

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

Décomposition QR

ce qui se réécrit

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

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 $q^1, \cdots, q^{j-1}$, 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

$$R_{j,j}q_j = a_j - R_{j-1,j}q^{j-1} - \cdots - R_{1,j}q1$$

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 ${}^t(r_{1,1}, 0, \cdots, 0)$. 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

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

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

$$A^{(n)} = H^{(n?1)} \cdots H^{(1)} A$$

et la matrice $A^{(n)}$ est triangulaire supérieure. Si l'on pose ${}^t Q = H^{(n-1)} \cdots H^{(1)}$, Q est une matrice orthogonale et $A = {}^t Q^{-1} A^{(n)} = QA^{(n)}$. 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 ${}^tOAO$ soit diagonale.

$$^tOAO = \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \ddots & 0 & \\ 0 & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

La méthode de Jacobi consiste à construire une suite de matrices de rotation $O^{(k)}$ telles que la suite définie par $A^{(k+1)} = {}^tO^{(k)}A^{(k)}O^{(k)}$ converge vers Λ. Soit R_θ^{pq} la matrice de rotation dans le plan (e_p, e_q) d'angle θ :

Méthode de Jacobi

$$
R_{p,q}(\theta) = \begin{array}{cc}
 & \begin{array}{ccccccccccc} & & & \mathbf{p} & & & & \mathbf{q} & & & \end{array} \\
\begin{array}{c} \\ \\ \\ \mathbf{p} \\ \\ \\ \\ \mathbf{q} \\ \\ \\ \\ \end{array} &
\left[\begin{array}{ccccccccccc}
1 & & & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & & & \\
 & \ddots & & \vdots & & & & \vdots & & & \\
 & & 1 & 0 & & & & 0 & & & \\
0 & \cdots & 0 & \cos(\theta) & 0 & \cdots & 0 & \sin(\theta) & 0 & \ldots & 0 \\
 & & & 0 & 1 & & & 0 & & & \\
 & & & \vdots & & \ddots & & \vdots & & & \\
 & & & 0 & & & 1 & 0 & & & \\
 & & & -\sin(\theta) & 0 & \cdots & 0 & \cos(\theta) & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{array}\right]
\end{array}
$$

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

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

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 $|a^{(1)}_{p_2,q_2}| = \max_{i \neq j} |a^{(1)}_{i,j}|$. 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 $a^{(2)}_{p_2,q_2} = 0$. Puisque $p_2 \neq p_1, q_1, q_2 \neq p_1, q_1$, on a aussi $a^{(2)}_{p_1,q_1} = 0$.

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 $A^{(k)} = {}^tR_{p_k,q_k}(\theta_k)A^{(k-1)}R_{p_k,q_k}(\theta_2)$ vérifie $a_{p_k,q_k}^{(k)} = 0$. On a $a_{p_1,q_1}^{(k)} = \cdots = a_{p_k,q_k}^{(k)} = 0$.
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,
$A^{(k)} = {}^tR_{p_k,q_k}(\theta_k)\cdots {}^tR_{p_1,q_1}(\theta_1)AR_{p_1,q_1}\cdots R_{p_k,q_k}(\theta_k) = {}^tO^{(k)}AO^{(k)}$,
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 et 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 ci non nuls, sinon on décompose B par blocs qui ont les mêmes valeurs propres. On note p_i le polynôme caractéristique de la matrice Ai définie pour $i \geq 1$ par

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

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. $\lim\limits_{\lambda \to \infty} p_i(\lambda) = \infty, 1 \leq i \leq n$
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 $\{p_0(\lambda), \cdots, p_n(\lambda)\}$. 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 $k = 1, 2, \cdots$, 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 q0 n'est pas orthogonal à V . Alors on a

1. $\underset{\lambda\to\infty}{lim} \|Aq_k\|_2 = |\lambda_1|$
2. $\underset{\lambda\to\infty}{lim} \lambda_j^{(k)} = \lambda_1, 1 \leq j \leq n$, si $q_j^{(k)} \neq 0$
3. $\underset{\lambda\to\infty}{lim} (\frac{|\lambda_1|}{\lambda_1})^k q^{(k)}$ 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}.