Chapitre 2

QUELQUES MÉTHODES DIRECTES POUR LA RÉSOLUTION DE SYSTÈMES LINÉAIRES

Chapitre 2

QUELQUES MÉTHODES DIRECTES POUR LA RÉOLUTION DE SYSTÈMES LINÉAIRES

2.1 La méthode de Gauss

La méthode de Gauss est une méthode générale de résolution d'un système linéaire :

$$(2.1) \quad Ax = b$$

où A est une matrice inversible de $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, sans que l'on n'exige de propriétés particulières supplémentaires.

Elle consiste à se ramener à un système triangulaire supérieur (admettant la même solution que le système linéaire (2.1)), obtenu par élimination successive des inconnues dans les différentes équations du système.

En utilisant des notations classiques, (2.1) s'écrit sous la forme :

$$(2.2) \quad \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Décrivons la première étape de l'élimination. L'un au moins des éléments a_{i1} , $1 \leq i \leq n$, de la première colonne de la matrice $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ est non nul, sans quoi la matrice A serait non inversible. On choisit alors le plus grand coefficient en valeur absolue de la première colonne de A , qu'on appelle le *pivot d'élimination*. Ensuite, on échange la ligne du pivot avec la première ligne, ce qui en écriture matricielle consiste à multiplier la matrice A à gauche par une matrice de permutation $P^{(1)}$ particulière obtenue en échangeant les lignes 1 et i_1 de la matrice identité I :

$$P^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & 1 & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \ddots & \vdots & \cdots & \circ & \vdots \\ 1 & \cdots & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 1 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \circ & \vdots & \cdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix} \leftarrow i_1 \quad i_1 : \text{ligne pivot, } i_1 \geq 1.$$

$\uparrow$
 i_1

Lorsque $i_1 = 1$, on a $P^{(1)} = I$.

La matrice $A^{(1)} = P^{(1)}A = (a_{ij}^{(1)})_{1 \leq i, j \leq n}$ ainsi obtenue est telle que :

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} \neq 0, & \text{pivot de la première ligne} \\ |a_{11}^{(1)}| = \max_{1 \leq i \leq n} |a_{i1}|. \end{cases}$$

Par des combinaisons linéaires appropriées de la première ligne et des autres lignes de la matrice $A^{(1)} = P^{(1)}A$, on annule ensuite tous les éléments de la première colonne de la matrice

$A^{(1)}$ situés sous la diagonale, la première ligne restant inchangée. En écriture matricielle, ceci revient à multiplier la matrice $A^{(1)}$ à gauche par la matrice :

$$E^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -a_{21}^{(1)}/\alpha_1 & \ddots & & & \\ \vdots & & \ddots & & \circ \\ -a_{i1}^{(1)}/\alpha_1 & & & \ddots & \\ \vdots & & \circ & & \ddots \\ -a_{n1}^{(1)}/\alpha_1 & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{où } \alpha_1 = a_{11}^{(1)}$$

de sorte que la matrice

$$\tilde{A}^{(2)} = E^{(1)} A^{(1)} = E^{(1)} P^{(1)} A$$

soit de la forme

$$\tilde{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & \tilde{a}_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \tilde{a}_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \tilde{a}_{n2}^{(2)} & \cdots & \cdots & \tilde{a}_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}$$

Les coefficients de la matrice $\tilde{A}^{(2)}$ sont alors donnés par :

$$\begin{cases} \tilde{a}_{1j}^{(2)} = a_{1j}^{(1)}, & 1 \leq j \leq n, \text{ la 1ère ligne de } A^{(1)} \text{ est inchangée.} \\ \tilde{a}_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} a_{1j}^{(1)}, & 2 \leq i, j \leq n. \\ \tilde{a}_{i1}^{(2)} = 0, & 2 \leq i \leq n. \end{cases}$$

Notons au passage que la matrice $\tilde{A}^{(2)}$ est nécessairement inversible, puisque

$$\det \tilde{A}^{(2)} = \underbrace{\det E^{(1)}}_{=1} \times \underbrace{\det P^{(1)}}_{=\pm 1} \times \det A = \pm \det A,$$

selon que l'on ait, ou non, effectué un échange de lignes. Par conséquent, l'un au moins des éléments $\tilde{a}_{i2}^{(2)}$, $2 \leq i \leq n$, est non nul, et la seconde étape d'élimination consiste à effectuer les mêmes opérations que précédemment, mais seulement sur la sous-matrice $(\tilde{a}_{ij}^{(2)})_{2 \leq i, j \leq n}$, en laissant inchangée la première ligne et ainsi de suite

On obtient de proche en proche comme résultat de la $(k-1)$ -ème étape de l'élimination, $2 \leq k \leq n$, une matrice

$$\tilde{A}^{(k)} = E^{(k-1)} P^{(k-1)} \dots P^{(2)} E^{(1)} P^{(1)} A$$

qui est de la forme :

$$\tilde{A}^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & & & \vdots \\ & & & \tilde{a}_{kk}^{(k)} & \cdots & \tilde{a}_{kn}^{(k)} \\ & \circ & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & \tilde{a}_{nk}^{(k)} & \cdots & \tilde{a}_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}$$

Décrivons alors la k -ème étape de l'élimination. Puisque

$$\det \tilde{A}^{(k)} = \pm \det A,$$

la matrice $\tilde{A}^{(k)}$ est inversible et donc l'un au moins des éléments $\tilde{a}_{i_k}^{(k)}$, $k \leq i \leq n$, est non nul, sans quoi les k premières colonnes de A seraient dans le sous-espace engendré par les $(k-1)$ premiers vecteurs de la base canonique de $\mathbb{R}^n$. On choisit alors le plus grand de ces éléments en valeur absolue comme pivot et l'on échange la ligne i_k du pivot avec la k -ème ligne de la matrice $\tilde{A}^{(k)}$. En écriture matricielle, ceci revient à multiplier la matrice $\tilde{A}^{(k)}$ à gauche par une matrice de permutation $P^{(k)}$ de sorte que, par construction, l'élément $a_{kk}^{(k)}$ de la matrice $A^{(k)} = P^{(k)}\tilde{A}^{(k)}$ vérifie :

$$|a_{kk}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |\tilde{a}_{i_k}^{(k)}|.$$

La matrice de permutation $P^{(k)}$ est obtenue en échangeant la ligne k et la ligne i_k de la matrice identité I :

$$P^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & 0 & \vdots & 1 & \circ & \vdots \\ \vdots & \cdots & \cdots & 1 & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & 1 & \cdots & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \circ & \vdots & \cdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \leftarrow k \\ \\ \leftarrow i_k \\ \\ \end{matrix} \quad k \leq i_k, i_k : \text{ ligne pivot.}$$

$\begin{matrix} \uparrow & \uparrow \\ k & i_k \end{matrix}$

Lorsque $i_k = k$, on a $P^{(k)} = I$.

L'élimination proprement dite équivaut à multiplier la matrice $A^{(k)} = P^{(k)}\tilde{A}^{(k)}$ à gauche par la matrice

$$E^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \circ \\ & & & 1 & & & \\ & & & -a_{k+1,k}^{(k)}/\alpha_k & 1 & & \\ \circ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & -a_{nk}^{(k)}/\alpha_k & & & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{où } \alpha_k = a_{kk}^{(k)}.$$

Les coefficients de la matrice $\tilde{A}^{(k+1)} = E^{(k)}A^{(k)}$ sont alors donnés par :

$$\begin{cases} \tilde{a}_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)}, & 1 \leq i \leq k, 1 \leq j \leq n \\ \tilde{a}_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{i_k}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} a_{kj}^{(k)}, & k+1 \leq i, j \leq n \\ \tilde{a}_{i_k}^{(k+1)} = 0, & k+1 \leq i \leq n. \end{cases}$$

Après la $(n-1)$ -ème étape de l'élimination, la matrice

$$(2.3) \quad U = \tilde{A}^{(n)} = E^{(n-1)}P^{(n-1)} \dots \dots E^{(1)}P^{(1)}A$$

est donc triangulaire supérieure :

$$U = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & \circ & \ddots & \vdots \\ & & & \tilde{a}_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}$$

La seconde phase de la méthode de Gauss est la résolution du système linéaire :

$$(2.4) \quad Ux = d,$$

où

$$d = E^{(n-1)}P^{(n-1)} \dots \dots E^{(1)}P^{(1)}b$$

qui admet la même solution que le système linéaire (2.1), puisque la matrice $E^{(n-1)}P^{(n-1)} \dots E^{(1)}P^{(1)}$ est inversible.

La résolution du système (2.4) s'effectue immédiatement par la méthode de remontée.

Comptons enfin le nombre d'opérations élémentaires requises dans la méthode de Gauss.

1— Élimination : Pour passer de la matrice $\tilde{A}^{(k)}$ à la matrice $\tilde{A}^{(k+1)}$, $1 \leq k \leq n-1$, on effectue $(n-k)$ divisions, $(n-k)^2$ additions et $(n-k)^2$ multiplications, soit au total

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) = \frac{n(n-1)}{2} \quad \text{divisions}$$

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} \quad \text{additions}$$

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} \quad \text{multiplications}$$

soit de l'ordre de $2n^3/3$ opérations élémentaires lorsque n est "assez grand".

2— Pour passer du vecteur b au vecteur $d = E^{(n-1)}P^{(n-1)} \dots \dots E^{(1)}P^{(1)}b$, on effectue, à chaque étape k , $(n-k)$ additions et $(n-k)$ multiplications, soit au total $n(n-1)/2$ additions et $n(n-1)/2$ multiplications. Soit de l'ordre de n^2 opérations élémentaires lorsque n est "assez grand".

3— La méthode de remontée, nécessite de l'ordre de n^2 opérations élémentaires lorsque n est "assez grand" (c.f. chapitre 1).

En fin de compte la méthode de Gauss nécessite donc de l'ordre de $2n^3/3$ opérations élémentaires. ■

Commentaires :

Considérons le système linéaire :

$$(2.5) \quad \begin{cases} 10^{-6}x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

dont la solution exacte est $x_1 = \frac{1}{1-10^{-6}}$, $x_2 = 1 - \frac{10^{-6}}{1-10^{-6}}$, et supposons qu'on fasse les calculs à 10^{-6} près.

On peut prendre le nombre $a_{11} = 10^{-6}$ comme pivot puisqu'il n'est pas nul, ce qui conduit après élimination au système linéaire

$$(2.6) \quad \begin{cases} 10^{-6}x_1 + x_2 = 1 \\ (1 - 10^6)x_2 = 2 - 10^6 \end{cases}$$

Comme les nombres $1 - 10^6$ et $2 - 10^6$ sont arrondis chacun au même nombre -10^6 , alors la "solution" de (2.6) trouvée en effectuant une "remontée" est $x_2 = 1$ et $x_1 = 0$, qui constitue une mauvaise approximation de la solution de (2.5).

Par contre, si l'on commence par permuter les deux équations de (2.5) pour obtenir le plus grand pivot en valeur absolue, on est conduit au système suivant :

$$(2.7) \quad \begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ 10^{-6}x_1 + x_2 = 1 \end{cases}$$

qui, après élimination, devient

$$(2.8) \quad \begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ (1 - 10^{-6})x_2 = 1 - 2 \cdot 10^{-6} \end{cases}$$

La solution de (2.8) est alors donnée en effectuant une "remontée" par $x_2 = 1$ et $x_1 = 1$, puisque les nombres $1 - 10^{-6}$ et $1 - 2 \cdot 10^{-6}$ sont arrondis chacun au même nombre 1. Dans ce cas, le résultat est satisfaisant.

Cet exemple montre l'effet désastreux des *erreurs d'arrondi* qui proviennent de la division par des pivots "trop petits". C'est pourquoi, dans la pratique, on utilise l'une des deux stratégies suivantes, au début de la k -ème étape de l'élimination, $1 \leq k \leq n - 1$:

–*stratégie du pivot partiel* : le pivot est l'un des éléments $a_{pk}^{(k)}$, $k \leq p \leq n$, qui vérifie

$$\left| a_{pk}^{(k)} \right| = \max_{k \leq i \leq n} \left| a_{ik}^{(k)} \right|.$$

–*stratégie du pivot total* : le pivot est l'un des éléments $a_{pq}^{(k)}$, $k \leq p, q \leq n$, qui vérifie

$$\left| a_{pq}^{(k)} \right| = \max_{k \leq i, j \leq n} \left| a_{ij}^{(k)} \right|.$$

Si le pivot choisi par cette stratégie n'est pas dans la k -ème colonne, il faut donc également effectuer un *échange de colonnes* en plus de l'échange de lignes. ■

Méthode de Gauss-Jordan :

La méthode de Gauss-Jordan est une méthode voisine dans son principe de la méthode de Gauss. Elle consiste à éliminer certaines inconnues dans le système linéaire de départ de telle sorte que le système linéaire obtenu à la fin corresponde à une matrice diagonale. Pour cela, à l'étape k de la phase d'élimination, on annule tous les termes de la colonne k , sauf évidemment le pivot. En écriture matricielle, ceci revient à multiplier la matrice $A^{(k)}$ à gauche par la matrice :

$$\tilde{E}^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & & -a_{1k}^{(k)}/\alpha_k & & \\ & \ddots & \vdots & & \circ \\ & & 1 & -a_{k-1,k}^{(k)}/\alpha_k & \\ & & & 1 & \\ & \circ & & -a_{k+1,k}^{(k)}/\alpha_k & \\ & & & \vdots & \ddots \\ & & & -a_{nk}^{(k)}/\alpha_k & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{où } \alpha_k = a_{kk}^{(k)}.$$

La matrice $\tilde{A}^{(k+1)} = \tilde{E}^{(k)} A^{(k)}$ ainsi obtenue, est alors de la forme :

$$\tilde{A}^{(k+1)} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_{11}^{(1)} & 0 & \cdots & 0 & \tilde{a}_{1,k+1}^{(k+1)} & \cdots & \tilde{a}_{1n}^{(k+1)} \\ & \tilde{a}_{22}^{(2)} & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & \ddots & 0 & \vdots & & \vdots \\ & & & \tilde{a}_{kk}^{(k)} & \vdots & & \vdots \\ & \circ & & 0 & \tilde{a}_{k+1,k+1}^{(k+1)} & & \vdots \\ & & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & 0 & \tilde{a}_{n,k+1}^{(k+1)} & \cdots & \tilde{a}_{nn}^{(k+1)} \end{pmatrix}$$

Ainsi, après la $(n-1)$ -ème étape d'élimination, la matrice :

$$D = \tilde{A}^{(n)} = \tilde{E}^{(n-1)} P^{(n-1)} \dots \tilde{E}^{(1)} P^{(1)} A$$

est diagonale, et la résolution du système linéaire ainsi obtenu ne nécessite que n opérations élémentaires.

Mais, en fait, si on compte le nombre d'opérations nécessaires à la résolution d'un système linéaire par la méthode de Gauss-Jordan, on se rend compte que celle-ci est plus coûteuse que la méthode de Gauss.

Cependant, pour certains problèmes particuliers, on peut avoir besoin de calculer la matrice A^{-1} . Dans ce cas, la méthode de Gauss-Jordan est plus performante que la méthode de Gauss, puisque la matrice D^{-1} et les produits de matrices $\tilde{E}^{(n-1)} P^{(n-1)} \dots \tilde{E}^{(1)} P^{(1)}$ sont "numériquement faciles à calculer" et l'on obtient alors aisément :

$$A^{-1} = D^{-1} \tilde{E}^{(n-1)} P^{(n-1)} \dots \tilde{E}^{(1)} P^{(1)}.$$

■

Donnons à présent quelques propriétés essentielles des matrices de permutation $P^{(k)}$ et des matrices d'élimination $E^{(k)}$ intervenant dans la méthode de Gauss.

Propriétés 2.1

1) La matrice de permutation $P^{(k)}$, $1 \leq k \leq n-1$, est symétrique et orthogonale, donc $(P^{(k)})^2 = I$.

2) La matrice d'élimination $E^{(k)}$, $1 \leq k \leq n-1$, donnée par :

$$E^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & \circ & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & & -\ell_{k+1,k} & \ddots & & \\ & & \circ & & \vdots & & \ddots & \\ & & & & -\ell_{nk} & & & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{où } \ell_{ik} \equiv -E_{ik}^{(k)} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad k+1 \leq i \leq n$$

est inversible et son inverse est donnée par :

$$(E^{(k)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & \circ & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & & \ell_{k+1,k} & \ddots & & \\ & & \circ & & \vdots & & \ddots & \\ & & & & \ell_{nk} & & & 1 \end{pmatrix}$$

Démonstration : 1) Soit $P^{(k)}$ la matrice de permutation, $1 \leq k \leq n - 1$, obtenue en échangeant les lignes k et i_k de la matrice identité (i_k désignant la ligne du pivot) :

$$\left\{ \begin{array}{ll} P_{jj}^{(k)} = 1 & \text{pour } j \neq k \text{ et } j \neq i_k \\ P_{k,i_k}^{(k)} = P_{i_k,k}^{(k)} = 1 \\ P_{kk}^{(k)} = P_{i_k,i_k}^{(k)} = 0 \\ P_{ij}^{(k)} = 0 & \text{pour tous les autres cas.} \end{array} \right.$$

Soit $M \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$. Alors la matrice $P^{(k)}M$ est obtenue en échangeant les lignes k et i_k de M . De même, la matrice $(P^{(k)})^2 M$ est obtenue en échangeant les lignes k et i_k de $P^{(k)}M$. Ainsi, on a pour tout $M \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, $(P^{(k)})^2 M = M$, d'où $(P^{(k)})^2 = I$. Il s'en suit, puisque $P^{(k)}$ est symétrique, que $P^{(k)}$ est orthogonale.

2) Montrons que la matrice d'élimination $E^{(k)}$ est inversible et déterminons son inverse. Soient $(e^{(1)}, \dots, e^{(n)})$ la base canonique de $\mathbb{R}^n$ et $\ell^{(k)}$ le vecteur de $\mathbb{R}^n$ de composantes :

$$\ell_i^{(k)} = \begin{cases} 0, & 1 \leq i \leq k \\ -\ell_{ik}, & k+1 \leq i \leq n \end{cases}$$

On a alors :

$$(2.9) \quad \ell^{(k)} \left(e^{(k)} \right)^t = E^{(k)} - I$$

D'où, pour $k \leq j$, on a :

$$\begin{aligned} E^{(k)} E^{(j)} &= (I + \ell^{(k)}(e^{(k)})^t) (I + \ell^{(j)}(e^{(j)})^t) \\ &= I + \ell^{(k)}(e^{(k)})^t + \ell^{(j)}(e^{(j)})^t + \ell^{(k)}(e^{(k)})^t \ell^{(j)}(e^{(j)})^t \\ &= (\text{puisque } (e^{(k)})^t \ell^{(j)} = 0 \text{ pour } k \leq j) \\ &= I + \ell^{(k)}(e^{(k)})^t + \ell^{(j)}(e^{(j)})^t \end{aligned}$$

D'où l'on obtient grâce à (2.9) :

$$(2.10) \quad E^{(k)} E^{(j)} = E^{(k)} + E^{(j)} - I, \quad \text{pour } k \leq j.$$

En particulier, pour $k = j$, on a :

$$E^{(k)} E^{(k)} = 2E^{(k)} - I.$$

Et par suite, on a :

$$E^{(k)}(2I - E^{(k)}) = I \quad \text{et} \quad (2I - E^{(k)})E^{(k)} = I.$$

Il s'en suit que $E^{(k)}$ est inversible et que $(E^{(k)})^{-1} = 2I - E^{(k)}$. Ce qui prouve le résultat énoncé et achève la démonstration. ■

Propriétés 2.2

Soient $E^{(1)}, E^{(2)}, \dots, E^{(n-1)}$ les matrices d'élimination. On a alors :

$$(2.11) \quad \begin{aligned} E^{(1)} E^{(2)} \dots E^{(n-1)} &= I + \ell^{(1)} (e^{(1)})^t + \dots + \ell^{(n-1)} (e^{(n-1)})^t \\ &= \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -\ell_{21}^{(1)} & 1 & & & \circ \\ \cdot & -\ell_{32}^{(2)} & \cdot & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \\ -\ell_{n1}^{(1)} & -\ell_{n2}^{(2)} & \cdot & -\ell_{n,n-1}^{(n-1)} & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

et

$$(2.12) \quad \begin{aligned} (E^{(n-1)} E^{(n-2)} \dots E^{(1)})^{-1} &= I - \ell^{(1)} (e^{(1)})^t - \dots - \ell^{(n-1)} (e^{(n-1)})^t \\ &= \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ \ell_{21}^{(1)} & 1 & & & \circ \\ \cdot & \ell_{32}^{(2)} & \cdot & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \\ \ell_{n1}^{(1)} & \ell_{n2}^{(2)} & \cdot & \ell_{n,n-1}^{(n-1)} & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

où :

$$\ell_{ik}^{(k)} \equiv E_{ik}^{(k)} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad \text{pour } k+1 \leq i \leq n$$

Démonstration : Montrons (2.11) par récurrence. On a, d'après (2.9) et (2.10), pour $i \leq j$:

$$E^{(i)} E^{(j)} = E^{(i)} + E^{(j)} - I = I + \ell^{(i)} (e^{(i)})^t + \ell^{(j)} (e^{(j)})^t$$

D'où l'on obtient :

$$E^{(1)} E^{(2)} = I + \ell^{(1)} (e^{(1)})^t + \ell^{(2)} (e^{(2)})^t.$$

Supposons que (2.11) est vérifiée jusqu'à l'ordre $k-1$, $k \leq n-1$. Alors, utilisant (2.9), on obtient :

$$\begin{aligned} E^{(1)} \dots E^{(k-1)} E^{(k)} &= \left(I + \ell^{(1)} (e^{(1)})^t + \dots + \ell^{(k-1)} (e^{(k-1)})^t \right) \left(I + \ell^{(k)} (e^{(k)})^t \right) \\ &= \text{(puisque } (e^{(i)})^t \ell^{(k)} = 0 \text{ pour } i \leq k) \\ &= I + \ell^{(1)} (e^{(1)})^t + \dots + \ell^{(k)} (e^{(k)})^t. \end{aligned}$$

Ainsi (2.11) est vérifiée pour tout $k \leq n-1$.

En utilisant la même démarche que ci-dessus, on montre (2.12). ■

Soit $U = \tilde{A}^{(n)}$ la matrice triangulaire supérieure obtenue par la méthode de Gauss :

$$U = E^{(n-1)} P^{(n-1)} \dots \dots E^{(1)} P^{(1)} A.$$

En posant $L^{(k)} = (E^{(k)})^{-1}$, $1 \leq k \leq n-1$, on obtient grâce aux propriétés 2.1 :

$$(2.13) \quad A = P^{(1)} L^{(1)} \dots \dots P^{(n-1)} L^{(n-1)} U.$$

et

$$L = \tilde{L}'^{(1)} \tilde{L}'^{(2)} \dots \tilde{L}'^{(n-1)}.$$

La matrice L est alors triangulaire inférieure à diagonale unité (à vérifier en exercice). Et par suite, grâce à (2.15), on obtient la factorisation $PA = LU$, où P est une matrice de permutation. ■

Supposons qu'on ne s'intéresse plus à l'effet des erreurs d'arrondi dans la méthode de Gauss et que, par voie de conséquence, on ne cherche plus à appliquer de stratégie particulière de pivot. Autrement dit, si l'élément a_{11} de la matrice A est non nul, on le prend comme pivot (i.e. $P^{(1)} = I$), si l'élément $\tilde{a}_{22}^{(2)}$ de la matrice $\tilde{A}^{(2)}$ est non nul, on le prend comme pivot (i.e. $P^{(2)} = I$); et ainsi de suite ... (les pivots étant par conséquent les éléments $\tilde{a}_{kk}^{(k)}$ des matrices $\tilde{A}^{(k)}$ obtenues par la méthode de Gauss. Une condition nécessaire et suffisante pour que ceci soit possible est donnée par le théorème suivant.

Théorème 2.2 (Factorisation LU)

Soit $A = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ une matrice carrée d'ordre n , inversible. Alors, A possède une factorisation $A = LU$, où L est une matrice triangulaire inférieure à diagonale unité et U est une matrice triangulaire supérieure, si et seulement si toutes les sous-matrices

$$(2.16) \quad M^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & \cdots & a_{kk} \end{pmatrix}, \quad 1 \leq k \leq n$$

de A sont inversibles.

De plus, si une telle factorisation existe, alors elle est unique.

Démonstration :

Considérons l'écriture par blocs suivante de la matrice A :

$$A = \begin{pmatrix} M^{(k)} & B^{(k)} \\ C^{(k)} & D^{(k)} \end{pmatrix}$$

où la matrice $M^{(k)} \in \mathcal{M}_k(\mathbb{R})$ est donnée par (2.16).

Supposons qu'il existe une matrice L triangulaire inférieure à diagonale unité et une matrice U triangulaire supérieure telles que $A = LU$. En désignant par $\bar{L}^{(k)}$ et $\bar{U}^{(k)}$ les sous-matrices de L et U obtenues par intersection des k premières lignes et des k premières colonnes, la factorisation $A = LU$ s'écrit sous la forme :

$$\begin{pmatrix} M^{(k)} & B^{(k)} \\ C^{(k)} & D^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{L}^{(k)} & O \\ * & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U}^{(k)} & * \\ O & * \end{pmatrix}$$

Et par suite, utilisant les règles de multiplication des matrices par blocs, on obtient

$$A = \begin{pmatrix} M^{(k)} & B^{(k)} \\ C^{(k)} & D^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{L}^{(k)} \bar{U}^{(k)} & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

Ainsi $M^{(k)} = \bar{L}^{(k)} \bar{U}^{(k)}$ et donc $\det M^{(k)} = \det \bar{L}^{(k)} \times \det \bar{U}^{(k)}$. Or la matrice A étant inversible, alors L et U sont inversibles et en particulier

$$\det \bar{L}^{(k)} = \prod_{i=1}^k \ell_{ii} \neq 0 \quad \text{et} \quad \det \bar{U}^{(k)} = \prod_{i=1}^k u_{ii} \neq 0.$$

Et par suite $\det M^{(k)} \neq 0$ et donc la matrice $M^{(k)}$ est inversible.

Réciproquement, supposons que toutes les sous-matrice $M^{(k)}$, $1 \leq k \leq n$, de A sont inversibles. Montrons qu'on peut appliquer les étapes de la factorisation $PA = LU$ donnée au théorème 2.1 sans effectuer d'échanges de lignes (i.e. $P = I$).

Comme le $\det M^{(1)} \neq 0$ alors $a_{11} \neq 0$ et par suite, on peut choisir a_{11} comme pivot de la première étape de la méthode de Gauss; dans ce cas la matrice de permutation $P^{(1)} = I$. Supposons qu'on ait pu choisir $P^{(1)} = P^{(2)} = \dots = P^{(k-1)} = I$, c'est-à-dire que $\tilde{a}_{11}^{(1)} \neq 0$, $\tilde{a}_{22}^{(2)} \neq 0, \dots$, et $\tilde{a}_{k-1,k-1}^{(k-1)} \neq 0$.

La matrice $\tilde{A}^{(k)}$ obtenue à la $(k-1)$ -ème étape de la méthode de Gauss est alors donnée par

$$\tilde{A}^{(k)} = E^{(k-1)} E^{(k-2)} \dots E^{(1)} A.$$

Cette égalité s'écrit sous la forme :

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} \tilde{a}_{11}^{(1)} & \dots & \tilde{a}_{1k}^{(1)} & \dots & \dots & \tilde{a}_{1n}^{(1)} \\ O & \ddots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ & & \tilde{a}_{kk}^{(k)} & \dots & \dots & \vdots \\ \hline & & \times & \times & \dots & \times \\ & O & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & \times & \times & \dots & \times \end{array} \right) = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & & O & & & \\ \times & \ddots & & & O & \\ \times & \times & 1 & & & \\ \hline & & & \times & & \\ * & & & & \ddots & \\ & & & & & \times \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} M^{(k)} & B^{(k)} \\ \hline C^{(k)} & D^{(k)} \end{array} \right)$$

où, d'après les propriétés 2.2, le produit $E^{(k-1)} \dots E^{(2)} E^{(1)}$ a été obtenu en juxtaposant la colonne 1 de $E^{(1)}$, la colonne 2 de $E^{(2)}$ et ainsi de suite jusqu'à la colonne $(k-1)$ de $E^{(k-1)}$ et en complétant avec les $(n-k+1)$ dernières colonnes de la matrice identité.

Utilisant les règles de multiplication des matrices par blocs, on obtient :

$$\tilde{a}_{11}^{(1)} \dots \tilde{a}_{kk}^{(k)} = \det M^{(k)}.$$

Comme, par hypothèse, $\det M^{(k)} \neq 0$, alors le terme $\tilde{a}_{kk}^{(k)} \neq 0$, puisque par hypothèse de récurrence, $\tilde{a}_{11}^{(1)} \neq 0$, $\tilde{a}_{22}^{(2)} \neq 0, \dots$, et $\tilde{a}_{k-1,k-1}^{(k-1)} \neq 0$. On peut donc choisir $\tilde{a}_{kk}^{(k)}$ comme pivot de la k -ème étape de la méthode de Gauss, ce qui équivaut au choix $P^{(k)} = I$.

Ainsi, l'existence d'une factorisation LU possédant les propriétés énoncées dans le théorème est donc établie, puisque toutes les matrices $P^{(k)}$ ont pu être choisies égales à l'identité et la matrice P intervenant dans l'énoncé du théorème 2.1 vaut donc dans ce cas l'identité.

Enfin, montrons l'unicité d'une telle factorisation. Supposons que la matrice A admette deux factorisations LU :

$$A = L_1 U_1 = L_2 U_2,$$

alors on a $L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1}$ et cette matrice est triangulaire supérieure et triangulaire inférieure, donc diagonale. Or la diagonale de $L_2^{-1} L_1$ est nécessairement la diagonale unité. Cette égalité $L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1}$ n'est donc possible que si

$$L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1} = I,$$

d'où $L_2 = L_1$ et $U_2 = U_1$. Ce qui prouve l'unicité et achève la démonstration. ■

Mise en œuvre de la factorisation LU :

Lorsque cette factorisation est possible, on pose a priori

$$L = \left(\begin{array}{cccc} 1 & & & \\ \ell_{21} & \ddots & \circ & \\ \vdots & & \ddots & \\ \ell_{n1} & \dots & \dots & 1 \end{array} \right) \quad \text{et} \quad U = \left(\begin{array}{cccc} u_{11} & \dots & \dots & u_{1n} \\ & \ddots & & \vdots \\ & \circ & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{array} \right)$$

De l'égalité $A = LU$, on déduit les relations :

$$a_{ij} = (LU)_{ij} = \sum_{k=1}^n \ell_{ik} u_{kj} = \sum_{k=1}^{\inf(i,j)} \ell_{ik} u_{kj}, \quad 1 \leq i, j \leq n$$

puisque $\ell_{pq} = u_{qp} = 0$ si $1 \leq p < q \leq n$.

On détermine d'abord la première ligne de U en utilisant les formules :

$$u_{1j} = a_{1j}, \quad 1 \leq j \leq n$$

ensuite la première colonne de L , dont les éléments sont donnés par :

$$\ell_{i1} = a_{i1}/u_{11}, \quad 2 \leq i \leq n.$$

Supposons que l'on ait calculé les $(p-1)$ premières lignes de U et les $(p-1)$ premières colonnes de L . On détermine alors la ligne p de U ensuite la colonne p de L en utilisant les formules suivantes :

$$u_{pj} = a_{pj} - \sum_{k=1}^{p-1} \ell_{pk} u_{kj}, \quad p \leq j$$

$$\ell_{ip} = \left(a_{ip} - \sum_{k=1}^{p-1} \ell_{ik} u_{kp} \right) / u_{pp}, \quad p < i.$$

Ce qui donne comme algorithme de détermination des matrices L et U :

Pour $p = 1$ à n **faire**

Début

Pour $j = p$ à n **faire**

$$u_{pj} = a_{pj} - \sum_{k=1}^{p-1} \ell_{pk} u_{kj}$$

Pour $i = p+1$ à n **faire**

$$\ell_{ip} = \left(a_{ip} - \sum_{k=1}^{p-1} \ell_{ik} u_{kp} \right) / u_{pp}$$

Fin

■

Remarque : Un intérêt majeur de la factorisation LU d'une matrice est de pouvoir résoudre plusieurs systèmes linéaires correspondant à la même matrice A . Pour cela, il suffit de conserver l'expression des matrices L et U une fois celles-ci calculées et de résoudre ensuite chaque système linéaire $Ax = b$ en résolvant deux systèmes linéaires triangulaires :

$$\begin{aligned} Ly &= b && \text{(par la méthode de descente),} \\ \text{puis} &&& \\ Ux &= y && \text{(par la méthode de remontée).} \end{aligned}$$

■

Remarque : Soit A une matrice inversible qui admet une factorisation LU , où L est triangulaire inférieure à diagonale unité et U est triangulaire supérieure. Comme $u_{ii} \neq 0$, $1 \leq i \leq n$, alors on peut écrire U sous la forme $U = DS$, où D est une matrice diagonale à coefficients $d_{ii} = u_{ii}$ et S est une matrice triangulaire supérieure à coefficients $s_{ij} = \frac{u_{ij}}{u_{ii}}$, $1 \leq i < j \leq n$. Ainsi A admet la décomposition $A = LDS$, et cette décomposition est unique.

■

Corollaire 2.1 (Factorisation de Crout)

Soit A une matrice symétrique inversible admettant une factorisation $A = LU$, où L est triangulaire inférieure à diagonale unité et U est triangulaire supérieure. Alors, A admet la factorisation

$$A = LDL^T,$$

où D est une matrice diagonale.

Démonstration :

Utilisant la remarque précédente, on a $A = LDS$, où S est une matrice triangulaire supérieure. Et par suite comme $A = A^T$, alors $A = LDS = S^T DL^T$. L'unicité de la décomposition LU de Gauss implique $S^T = L$. Ainsi $A = LDL^T$. ■

2.3 La factorisation de Cholesky

On considère dans cette section, une matrice A symétrique définie positive. La matrice A possède alors, d'après le théorème 2.2, une factorisation LU , puisque les sous-matrices $M^{(k)}$ définies par (2.16) sont elles mêmes définies positives et donc inversibles (c.f. série 2 d'exercices d'analyse numérique). Mais, comme on va le voir, on utilise la symétrie de A pour modifier légèrement la factorisation LU . Plus précisément, on va montrer au théorème suivant, qu'on peut factoriser A sous la forme $A = BB^T$, où B est triangulaire inférieure.

Théorème 2.3 (Factorisation de Cholesky)

Soit A une matrice symétrique définie positive. Alors, il existe une matrice réelle triangulaire inférieure B telle que

$$A = BB^T.$$

De plus, l'on peut imposer que les éléments diagonaux de la matrice B soient tous strictement positifs, et la factorisation $A = BB^T$ correspondante est alors unique.

Démonstration :

La matrice A étant symétrique définie positive, alors toutes les sous-matrices $M^{(k)}$, données par (2.16), sont définies positives et donc inversibles. Et par suite, grâce au théorème 2.2, la matrice A possède la factorisation $A = LU$.

Posons $U = DS$, où $D = \text{diag}(u_{ii})_{1 \leq i \leq n}$ est une matrice diagonale et où S est une matrice triangulaire supérieure dont le terme général est défini par :

$$\begin{cases} s_{ij} = \frac{u_{ij}}{u_{ii}}, & \text{pour } 1 \leq i < j \leq n \\ s_{ii} = 1, & \text{pour } 1 \leq i \leq n \\ s_{ij} = 0, & \text{pour } 1 \leq j < i \leq n. \end{cases}$$

On a alors

$$(2.17) \quad A = LDS = S^T DL^T,$$

puisque A est symétrique. La matrice S^T étant triangulaire inférieure à diagonale unité et DL^T étant une matrice triangulaire supérieure, alors (2.17) est une factorisation LU de A et donc, d'après l'unicité d'une telle factorisation, on a :

$$\begin{cases} L = S^T \\ U = DL^T \end{cases}$$

Ainsi, A s'écrit sous la forme

$$(2.18) \quad A = LDL^T$$

Si on note $\bar{L}^{(k)}$, respectivement $\bar{U}^{(k)}$, la sous-matrice de L , respectivement de U , obtenue comme intersection des k premières lignes et des k premières colonnes, alors utilisant les règles de multiplication des matrices par blocs et en tenant compte des structures particulières des matrices, on obtient :

$$\begin{aligned} M^{(k)} &= \bar{L}^{(k)}\bar{U}^{(k)} \\ \det M^{(k)} &= \det \bar{L}^{(k)} \times \det \bar{U}^{(k)} = \det \bar{U}^{(k)}, \end{aligned}$$

puisque $\det \bar{L}^{(k)} = 1$, $1 \leq k \leq n$. Or, la matrice $M^{(k)}$ étant définie positive, alors $\det M^{(k)} > 0$ et par suite, pour tout $k \in \{1, 2, \dots, n\}$ on a :

$$\det \bar{U}^{(k)} = \prod_{i=1}^k u_{ii} > 0.$$

Ainsi $u_{ii} > 0$ pour tout $i \in \{1, 2, \dots, n\}$.

Soit Λ la matrice définie par $\Lambda = \text{diag}(\sqrt{u_{ii}})_{1 \leq i \leq n}$, alors en posant $B = L\Lambda$ et en utilisant (2.18), on obtient $A = BB^T$, car $\Lambda^2 = D$. Ce qui prouve le résultat souhaité, puisque la matrice B est triangulaire inférieure.

Montrons que cette factorisation est unique dans le cas où la diagonale de B est strictement positive. Soient pour cela, deux matrices $B = (b_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ et $\tilde{B} = (\tilde{b}_{ij})_{1 \leq i, j \leq n}$ triangulaires inférieures à diagonales strictement positives telles que :

$$(2.19) \quad A = BB^T = \tilde{B}\tilde{B}^T.$$

En posant $\Delta_B = \text{diag}(b_{ii})_{1 \leq i \leq n}$ et $\Delta_{\tilde{B}} = \text{diag}(\tilde{b}_{ii})_{1 \leq i \leq n}$, on obtient, grâce à (2.19) :

$$(2.20) \quad A = B\Delta_B^{-1}\Delta_B B^T = \tilde{B}\Delta_{\tilde{B}}^{-1}\Delta_{\tilde{B}}\tilde{B}^T.$$

Comme les matrices $B\Delta_B^{-1}$ et $\tilde{B}\Delta_{\tilde{B}}^{-1}$ sont triangulaires inférieures à diagonale unité et les matrices $\Delta_B B^T$ et $\Delta_{\tilde{B}}\tilde{B}^T$ sont triangulaires supérieures, alors, utilisant l'unicité de la factorisation LU d'une matrice inversible, on obtient, grâce à (2.20) :

$$(2.21) \quad B\Delta_B^{-1} = \tilde{B}\Delta_{\tilde{B}}^{-1}$$

$$(2.22) \quad \Delta_B B^T = \Delta_{\tilde{B}}\tilde{B}^T.$$

Utilisant (2.22), on obtient pour tout $i \in \{1, \dots, n\}$, $b_{ii}^2 = \tilde{b}_{ii}^2$ et donc $b_{ii} = \tilde{b}_{ii}$, puisque les diagonales de B et $\tilde{B}$ sont strictement positives. Et par suite, d'après (2.21), on a $B = \tilde{B}$. Ce qui prouve l'unicité et achève la démonstration. ■

La méthode de Cholesky :

La méthode de Cholesky, pour résoudre un système linéaire $Ax = b$ où A est une matrice symétrique définie positive, consiste à calculer la factorisation de cholesky $A = BB^T$, puis à résoudre successivement les deux systèmes linéaires suivants à matrices triangulaires :

$$By = b, \text{ puis } B^T x = y.$$

Le vecteur x ainsi obtenu vérifie alors

$$Ax = BB^T x = By = b.$$

Mise en œuvre de la factorisation de Cholesky :

Soit A une matrice symétrique définie positive. On pose a priori

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & & & \\ \vdots & b_{22} & \circ & \\ \vdots & & \ddots & \\ b_{n1} & \cdots & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix}$$

De l'égalité $A = BB^T$ on déduit les relations

$$(2.23) \quad a_{ij} = (BB^T)_{ij} = \sum_{k=1}^n b_{ik}b_{jk} = \sum_{k=1}^{\inf(i,j)} b_{ik}b_{jk}, \quad 1 \leq i, j \leq n$$

puisque $b_{pq} = 0$ si $1 \leq p < q \leq n$. La matrice A étant symétrique, il suffit que les relations (2.23) ci-dessus soient vérifiées pour $j \leq i$, par exemple, et par suite les éléments b_{ij} de B doivent vérifier

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^j b_{ik}b_{jk}, \quad 1 \leq j \leq i \leq n.$$

Calcul de B colonne par colonne :

Pour $j = 1$, on obtient

$$a_{i1} = b_{i1}b_{11}, \quad 1 \leq i \leq n$$

et en particulier, on a

$$a_{11} = b_{11}^2$$

et en imposant aux coefficients diagonaux de B d'être strictement positifs, on obtient

$$b_{11} = \sqrt{a_{11}}.$$

Une fois b_{11} calculé, on détermine la première colonne de B en utilisant les relations

$$b_{i1} = a_{i1}/b_{11}, \quad \text{pour } i \geq 2.$$

De proche en proche, on détermine la j -ème colonne de B en calculant d'abord

$$b_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{jk}^2}$$

ensuite

$$b_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik}b_{jk}}{b_{jj}}, \quad i = j+1, \dots, n$$

après avoir calculé les $(j-1)$ premières colonnes de B .

Ce qui donne pour algorithme de calcul de B colonne par colonne :

Pour $j = 1$ à n faire

Début

$$b_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{jk}^2 \right)^{1/2}$$

Pour $i = j + 1$ à n **faire**

$$b_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik}b_{jk} \right) / b_{jj}$$

Fin

Le nombre d'opérations élémentaires nécessaires pour calculer la matrice B par les formules données ci-dessus est :

$$\frac{n^3 - n}{6} [\text{multiplication}] + \frac{n^3 - n}{6} [\text{addition}] + \frac{n(n-1)}{2} [\text{division}] + n [\text{extractions de racines}]$$

Soit de l'ordre de $n^3/3$ opérations élémentaires, lorsque n est "assez grand".

Il faut noter que pour calculer la colonne j de B , on commence par calculer le terme diagonal b_{jj} ensuite les termes b_{ij} pour $i \geq j + 1$.

Calcul de B ligne par ligne :

En suivant la même démarche que ci-dessus, l'algorithme de calcul de B ligne par ligne est donné par :

Pour $i = 1$ à n **faire**

Début

Pour $j = 1$ à $i - 1$ **faire**

Début

$$b_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik}b_{jk} \right) / b_{jj}$$

Fin

$$b_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik}^2 \right)^{1/2}$$

Fin

Il faut noter que pour calculer la ligne i de B , on commence d'abord par calculer les termes b_{ij} , pour $1 \leq j \leq i - 1$, et ensuite on calcule le terme de la diagonale b_{ii} . ■

Pour finir cette section, nous donnons une propriété intéressante de la factorisation de Cholesky d'une matrice.

Propriétés 2.3

Si les coefficients a_{ij} de la matrice symétrique définie positive A vérifient

$$a_{ij} = 0, \quad \text{pour } 1 \leq j \leq p(i) < i$$

où $p(i)$ est tel que $a_{i,p(i)+1} \neq 0$, alors les coefficients b_{ij} de la matrice B vérifient

$$b_{ij} = 0, \quad \text{pour } 1 \leq j \leq p(i) < i.$$

On dit que le tableau d'indices $p(i)$, $i \in \{1, 2, \dots, n\}$, décrit le profil de la matrice A et que la factorisation de Cholesky conserve le profil de la matrice.

Démonstration :

Soit $i \geq 2$. Si $p(i) = 1$, on n'a rien à vérifier ($b_{i1} = a_{i1} = 0$). Si $p(i) > 1$, on va démontrer par récurrence sur j que $b_{ij} = 0$ pour $j \in \{1, 2, \dots, p(i)\}$.

On a d'abord $b_{i1} = a_{i1}/b_{11} = 0$. En supposant que $b_{ik} = 0$ pour $1 \leq k \leq j-1 < p(i)$, et en utilisant la relation

$$b_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \underbrace{b_{ik}}_{=0} b_{jk} \right) / b_{jj}$$

on vérifie facilement que $b_{ij} = 0$. Ainsi, la matrice B possède le même profil que la matrice A . ■

Remarque : Si à l'intérieur du profil de A (i.e $j > p(i)$), il existe i et j tels que $a_{ij} = 0$, alors le terme correspondant dans B , à savoir b_{ij} , peut être non nul. ■

2.4 Méthode de Householder et factorisation QR

On s'intéresse dans cette section à la factorisation $A = QR$ d'une matrice carrée à coefficients réels A , où Q est une matrice orthogonale et R est une matrice triangulaire supérieure. La résolution du système linéaire $Ax = b$ se ramène alors à la résolution du système linéaire triangulaire supérieur $Rx = Q^T b$. Notons que la factorisation $A = QR$ conserve le conditionnement de la matrice, puisque $\text{cond}_2(A) = \text{cond}_2(QR) = \text{cond}_2(R)$.

Pour calculer les matrices Q et R on utilise, par exemple, la méthode de Householder qui sera présentée dans la section suivante.

2.4.1 La méthode de Householder

Définition 2.1

On appelle matrice de Householder élémentaire associée à un vecteur $u \in \mathbb{R}^n$ tel que $\|u\|_2 = 1$, la matrice H_u définie par :

$$H_u = I - 2uu^t.$$

■

Propriétés 2.4

Soit $u \in \mathbb{R}^n$ tel que $\|u\|_2 = 1$. Alors, toute matrice de Householder élémentaire $H_u = I - 2uu^t$ est symétrique et orthogonale.

De plus, H_u est la matrice de la symétrie orthogonale par rapport à l'hyperplan P_u perpendiculaire à u , défini par :

$$P_u = \{v \in \mathbb{R}^n ; u^t v = 0\}.$$

Démonstration :

Il est clair que la matrice H_u est symétrique. Pour montrer que H_u est orthogonale, il suffit de montrer que $H_u^2 = I$. Or, on a

$$H_u^2 = I - 4uu^t + 4u \underbrace{u^t u}_{\in \mathbb{R}} u^t.$$

Il s'en suit que $H_u^2 = I$, puisque $\|u\|_2 = 1$.

Par ailleurs, il est clair que $H_u u = -u$ et que pour tout $v \in P_u$, on a $H_u v = v$. Ce qui prouve que H_u est la matrice de la symétrie orthogonale par rapport à P_u . ■

Proposition 2.1

Soit $a \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$. Alors, il existe un vecteur $u \in \mathbb{R}^n$ et un réel α tels que :

$$(2.24) \quad H_u a = \alpha e^{(1)},$$

où $e^{(1)}$ est le premier vecteur de la base canonique de $\mathbb{R}^n$.

Démonstration :

Cherchons des conditions nécessaires que doivent vérifier u et α . Si un tel vecteur u existe, alors on a :

$$H_u a = (I - 2uu^t)a = a - 2u \underbrace{u^t a}_{\in \mathbb{R}} = \alpha e^{(1)},$$

et par suite, on obtient $-2(u^t a)u = \alpha e^{(1)} - a$. Ainsi u est nécessairement colinéaire au vecteur $\alpha e^{(1)} - a$. De plus, comme H_u est une matrice orthogonale, alors $\|H_u a\|_2 = \|a\|_2$. Ainsi, d'après (2.24), α est tel que $|\alpha| = \|a\|_2$.

Posons alors

$$u = \frac{\alpha e^{(1)} - a}{\|\alpha e^{(1)} - a\|_2},$$

avec $\alpha = \pm \|a\|_2$, et montrons que pour ce choix, on a $H_u a = \alpha e^{(1)}$. On a

$$(2.25) \quad H_u a = (I - 2uu^t)a = a - 2 \frac{(\alpha e^{(1)} - a)(\alpha e^{(1)} - a)^t}{\|\alpha e^{(1)} - a\|_2^2} a.$$

Or

$$(2.26) \quad (\alpha e^{(1)} - a)^t a = \alpha e^{(1)t} a - \|a\|_2^2 = \alpha a_1 - \|a\|_2^2$$

et

$$\|\alpha e^{(1)} - a\|_2^2 = (\alpha - a_1)^2 + \sum_{i=2}^n a_i^2 = \alpha^2 - 2\alpha a_1 + \|a\|_2^2$$

et puisque $\alpha = \pm \|a\|_2$, alors on obtient

$$\|\alpha e^{(1)} - a\|_2^2 = 2\|a\|_2^2 - 2\alpha a_1 = -2(\alpha a_1 - \|a\|_2^2).$$

Et par suite, grâce à (2.25) et (2.26), on trouve

$$H_u a = a - 2 \frac{(\alpha e^{(1)} - a)(\alpha a_1 - \|a\|_2^2)}{-2(\alpha a_1 - \|a\|_2^2)} = \alpha e^{(1)}.$$

Ce qui prouve (2.24) et achève la démonstration. ■

2.4.2 La factorisation QR

Soit A une matrice carrée d'ordre n à coefficients réels. On va transformer A , à l'aide de $n - 1$ transformations de Householder successives, en une matrice triangulaire supérieure R .

Décrivons la première étape. Soit $a \in \mathbb{R}^n$ la première colonne de A et H_1 la matrice de Householder élémentaire telle que

$$H_1 a = \alpha_1 e^{(1)}, \quad \text{avec } \alpha_1 = \pm \|a\|_2$$

où $H_1 = I - 2uu^t$ et où u est le vecteur défini par

$$u = \frac{\alpha_1 e^{(1)} - a}{\|\alpha_1 e^{(1)} - a\|_2}$$

et où $e^{(1)}$ désigne le premier vecteur de la base canonique de $\mathbb{R}^n$.

Dans la pratique, on choisit α_1 de signe opposé à celui de la première composante de a , à savoir a_1 . Ainsi $\alpha_1 = -\text{sgn}(a_1)\|a\|_2$. Ce choix nous permet d'éviter des divisions par des nombres trop "petits".

La matrice $A_1 = H_1A$ aura sa première colonne égale à $\alpha_1 e^{(1)}$ (par construction), c'est à dire que toutes ses composantes, sauf la première, sont nulles :

$$A_1 = H_1A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \cdots & \times \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{A}_1 & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

où $\tilde{A}_1 \in \mathcal{M}_{n-1}(\mathbb{R})$ est la sous-matrice formée des $(n-1)$ dernières lignes et $(n-1)$ dernières colonnes de la matrice A_1 .

Pour continuer, on applique une transformation analogue à la sous-matrice $\tilde{A}_1$. Plus précisément, soit $\tilde{a}^{(1)} \in \mathbb{R}^{n-1}$ la première colonne de $\tilde{A}_1 \in \mathcal{M}_{n-1}(\mathbb{R})$ et soit $\tilde{H}_2 \in \mathcal{M}_{n-1}(\mathbb{R})$ la matrice de Householder élémentaire telle que

$$\tilde{H}_2 \tilde{a}^{(1)} = \alpha_2 \tilde{e}^{(1)},$$

où $\tilde{e}^{(1)}$ est le premier vecteur de la base canonique de $\mathbb{R}^{n-1}$ et où $\alpha_2 = \pm \|\tilde{a}^{(1)}\|_2$. Posons

$$H_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{H}_2 & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

La matrice $A_2 = H_2A_1 = H_2H_1A$ est alors de la forme :

$$A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & \tilde{H}_2 & & \\ 0 & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \cdots & \times \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{A}_1 & \\ 0 & & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \cdots & \times \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{H}_2 \tilde{A}_1 & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

ou encore :

$$A_2 = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \cdots & \cdots & \times \\ 0 & \alpha_2 & \times & \cdots & \times \\ \vdots & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & & \tilde{A}_2 & \\ 0 & 0 & & & \end{pmatrix}$$

où $\tilde{A}_2 \in \mathcal{M}_{n-2}(\mathbb{R})$ est la sous-matrice formée des $(n-2)$ dernières lignes et $(n-2)$ dernières colonnes de la matrice A_2 .

Après la $(i-1)$ -ème étape, on obtient la matrice $A_{i-1} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ donnée par :

$$A_{i-1} = H_{i-1}H_{i-2} \cdots H_1A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \times & \cdots & \cdots & \times & \times \\ 0 & \alpha_2 & \times & \cdots & \cdots & \times & \times \\ \cdot & 0 & \ddots & \times & \cdots & \cdots & \vdots \\ \cdot & \cdot & 0 & \alpha_{i-1} & \times & \cdots & \times \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & & \tilde{A}_{i-1} & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & & & \end{pmatrix}$$

où la sous-matrice $\tilde{A}_{i-1} \in \mathcal{M}_{n-i+1}(\mathbb{R})$.

Décrivons la i -ème étape. Soient $\tilde{a}^{(i-1)} \in \mathbb{R}^{n-i+1}$ la première colonne de la matrice $\tilde{A}_{i-1}$ et $\tilde{H}_i \in \mathcal{M}_{n-i+1}(\mathbb{R})$ la matrice de Householder élémentaire telle que

$$\tilde{H}_i \tilde{a}^{(i-1)} = \begin{pmatrix} \alpha_i \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n-i+1}.$$

Posons

$$H_i = \begin{pmatrix} 1 & & 0 & & \\ & \ddots & & & \\ 0 & & 1 & & \\ & & & \tilde{H}_i & \\ & & O & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{i-1} & O \\ O & \tilde{H}_i \end{pmatrix}$$

où I_{i-1} désigne la matrice identité de $\mathcal{M}_{i-1}(\mathbb{R})$. La matrice H_i est appelée matrice de Householder.

La matrice $A_i = H_i A_{i-1}$ est alors de la forme :

$$A_i = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \times & \cdots & \cdots & \times \\ & \ddots & & & & \\ & & \alpha_i & \times & \cdots & \times \\ & & O & 0 & & \\ & & & \vdots & * & \\ & & & 0 & \times & \times \end{pmatrix}$$

À la $(n-1)$ -ème étape, la matrice $H_{n-1}H_{n-2}\dots H_1A$ est alors triangulaire supérieure. Soit R cette matrice

$$R = H_{n-1}H_{n-2}\dots H_1A.$$

Posons $Q = H_1H_2\dots H_{n-1}$. Alors Q est orthogonale, puisque, d'après la propriété 2.4, les matrices de Householder élémentaires $\tilde{H}_i$ sont orthogonales et donc les matrices de Householder H_i sont orthogonales. Ainsi, il existe une matrice orthogonale Q et une matrice triangulaire supérieure R telles que $A = QR$.

Complétons ce résultat par le théorème suivant.

Théorème 2.4 (Factorisation QR d'une matrice)

Soit A une matrice carrée réelle d'ordre n . Alors, il existe une matrice orthogonale Q , produit de $(n-1)$ matrices de Householder, et une matrice triangulaire supérieure R telles que

$$A = QR.$$

En outre, si A est inversible et si l'on impose $r_{ii} > 0$, $1 \leq i \leq n$, alors la factorisation $A = QR$ correspondante est unique.

Démonstration :

L'existence de la factorisation $A = QR$ est prouvée au début de la section 2.4.2.

Montrons l'unicité de la factorisation QR dans le cas où A est inversible (donc $r_{ii} \neq 0$) et $r_{ii} > 0$ pour $i \in \{1, \dots, n\}$.

Supposons qu'il existe deux matrices orthogonales Q_1 et Q_2 et deux matrices triangulaires supérieures R_1 et R_2 telles que

$$A = Q_1R_1 = Q_2R_2.$$

Soit Δ la matrice définie par

$$\Delta = R_2 R_1^{-1} = Q_2^T Q_1.$$

On a alors :

$$\Delta^T \Delta = (Q_2^T Q_1)^T (Q_2^T Q_1) = Q_1^T \underbrace{Q_2 Q_2^T}_{=I} Q_1 = Q_1^T Q_1 = I,$$

puisque les matrices Q_1 et Q_2 sont orthogonales. Comme la matrice Δ^T est triangulaire inférieure à diagonale strictement positive ($\Delta_{ii}^T = (R_2)_{ii}/(R_1)_{ii}$), alors $\Delta^T \Delta$ est une factorisation de Cholesky de la matrice identité I . Une telle factorisation étant unique, on a nécessairement $\Delta = I$. Ainsi, on a $R_1 = R_2$ et $Q_1 = Q_2$. Ce qui prouve l'unicité et achève la démonstration. ■

Pour finir ce chapitre, donnons le nombre d'opérations élémentaires nécessaires au calcul des matrices R et Q .

Proposition 2.2

La méthode de Householder pour calculer les matrices Q et R de la factorisation $A = QR$, où $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, nécessite de l'ordre de $4n^3/3$ opérations élémentaires, lorsque n est "assez grand".

Démonstration : À faire en exercice.

Remarquer qu'on n'a pas besoin de calculer Q et R explicitement, mais seulement le transformé de n'importe quel vecteur $v \in \mathbb{R}^p$ par la matrice de Householder élémentaire $\tilde{H}_p$, pour $p = n, n-1, \dots, 2$, c'est à dire le vecteur

$$\tilde{H}_p v = I - 2u \underbrace{u^t v}_{\in \mathbb{R}},$$

où $u \in \mathbb{R}^p$ est le vecteur associé à la matrice $\tilde{H}_p$. ■

Remarque : Dans la pratique, on utilise rarement la méthode de Householder pour résoudre un système linéaire, puisqu'elle coûte deux fois plus cher que la méthode de Gauss. Cependant, cette méthode de Householder présente un intérêt lorsque la matrice du système linéaire à résoudre est mal conditionnée, puisqu'elle garantit que le système final à résoudre, à savoir $Rx = Q^T b$, n'a pas un conditionnement plus mauvais que celui du système initial $Ax = b$.

La méthode de Householder pour calculer la factorisation QR d'une matrice A s'avère utile pour calculer les valeurs propres d'une matrice A comme on le verra lors de l'étude des méthodes de recherche des valeurs propres d'une matrice. ■