Méthodes Numériques

L2 MIASHS

Fabien Navarro

E-mail: fabien.navarro@univ-paris1.fr

UNIVERSITÉ PARIS 1 PANTHÉON SORBONNE

2. Résolution des systèmes linéaires, méthodes directes

2. Résolution des systèmes linéaires, méthodes directes

2.1 Introduction

Introduction

- Les méthodes de points fixes s'appliquent dans le cadre de la résolution de systèmes d'équations non linéaires.
- Les algorithmes résultants nécessitent d'inverser une matrice à chaque itération.
- Cette inversion est généralement remplacée par la résolution d'un système linéaire.
- Deux familles de méthodes peuvent être envisagées : directes ou itératives.
- La résolution de tels systèmes intervient dans de nombreux problèmes d'ingénierie et de science, ainsi que dans les applications des mathématiques aux sciences sociales et à l'étude quantitative des problèmes économique.

2. Résolution des systèmes linéaires, méthodes directes

2.1 Introduction

EXAMPLE (Régression linéaire multiple)

$$\vec{y} = X\vec{\beta} + \vec{\varepsilon},$$

où

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix},\ X = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{np} \end{pmatrix},\ \vec{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix},\ \vec{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix},$$

avec $\vec{y} \in \mathbb{R}^n$, X est une matrice $n \times (p+1)$, $\beta \in \mathbb{R}^{p+1}$, $\varepsilon \in \mathbb{R}^n$.
L'estimateur des moindres carrés ordinaires de $\vec{\beta}$

$$\hat{\vec{\beta}} = \arg \min_{\vec{\beta} \in \mathbb{R}^{p+1}} \|\vec{y} - X\vec{\beta}\|^2,$$

il est solution des équations normales :

$$X^T X \vec{\beta} = X^T \vec{y},$$

un système linéaire de la forme $A\vec{x} = \vec{b}$.

2. Résolution des systèmes linéaires, méthodes directes
2.1 Introduction

But
On considère des méthodes directes pour résoudre des systèmes linéaires : $A\vec{x} = \vec{b}$

Par techniques directes, on désigne toute méthode qui permet d'obtenir la solution en un nombre fini de manipulations.

i.e., Trouver $\vec{x}$ tel que $A\vec{x} = \vec{b}$.

Approche
Transformer le problème initial $A\vec{x} = \vec{b}$ en un problème équivalent faisant intervenir une (ou plusieurs) matrice(s) triangulaire(s) (inférieur et/ou supérieur).

Outils
L' élimination de Gauss est le principal ingrédient pour la résolution directe des systèmes d'équations linéaires.

On considère des méthodes directes pour résoudre un système linéaire de la forme :

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1, & (L_1) \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2, & (L_2) \\ \ldots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n, & (L_n) \end{cases} \quad (1)$$

Nous utilisons trois opérations élémentaires pour simplifier le système linéaire, en un autre plus facile à résoudre, conservant les mêmes solutions.

1. Multiplication de L_i par une constante non nulle λ : $(\lambda L_i) \to (L_i)$.
2. Combinaison linéaire de L_i et L_j : $(L_i + \lambda L_j) \to (L_i)$.
3. Substitution de L_i et L_j : $(L_i) \leftrightarrow (L_j)$.

NOTATIONS
1. On note $\mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, l'ensemble des matrices carrées d'ordre n. Soit $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

2. $\vec{b} \in \mathbb{R}^n$

$$\vec{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

3. $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

Soient $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ et $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ et $\vec{b} \in \mathbb{R}^n$.
Le système d'équations linéaires (1) se réécrit sous forme matricielle

$$A\vec{x} = \vec{b}.$$

L'ensemble des solutions satisfait l'une des conditions suivantes :

1. Le système a une solution unique.
2. Le système a une infinité de solutions.
3. Le système n'a pas de solution.

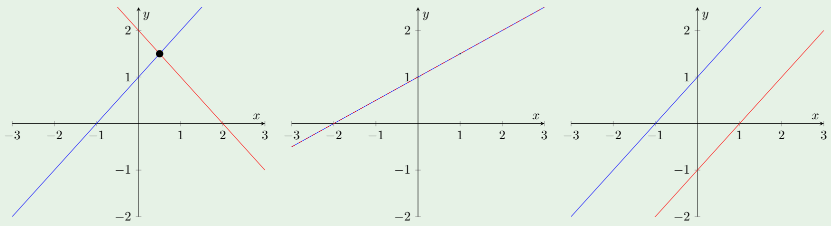
Le système a une solution unique si et seulement si

$$\det(A) \neq 0,$$

ou de manière équivalente, A est inversible.

EXEMPLE

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 0.5 & -1 \\ 0.5 & -1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$



DEFINITION

Une matrice A est dite triangulaire supérieure, respectivement inférieure

1. si $a_{ij} = 0$, pour $1 \leq j < i \leq n$ (Tri. sup.) ;
2. si $a_{ij} = 0$, pour $1 \leq i < j \leq n$ (Tri. inf.).

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & 0 \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

REMARQUE

Résoudre le système $A\vec{x} = \vec{b}$, lorsque A est triangulaire (sup ou inf) est immédiat !

En effet,

1. A Tri. sup (Remonter) :
$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}},$$
pour $i = n-1$ à 1,
$$x_i = \frac{b_i - a_{ii+1}x_{i+1} + \ldots + a_{in}x_n}{a_{ii}} = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j}{a_{ii}}.$$
2. A Tri. inf (Descente) :
$$x_1 = \frac{b_1}{a_{11}},$$
pour $i = 2$ à n,
$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j}{a_{ii}}.$$

EXEMPLE

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 8 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$x_3 = \frac{b_3}{a_{33}} = \frac{1}{-1} = -1$$
$$x_2 = \frac{b_2 - a_{23}x_3}{a_{22}} = \frac{1 - 1/2(-1)}{1/2} = 3$$
$$x_1 = \frac{b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3}{a_{11}} = \frac{8 - 1 \times 3 - (-1)(-1)}{2} = 2$$

```
A <- matrix(c(2, 1, -1, 0, 1/2, 1/2,
              0, 0, -1), ncol = 3, byrow = T)
b <- c(8, 1, 1)
solve(A,b)
```

```
## [1]  2  3 -1
```

La méthode de Gauss

La méthode de Gauss consiste à partir d'un système $A\vec{x} = \vec{b}$, puis, à l'aide de manipulations élémentaires, définir un système équivalent :

$$\widetilde{A}\vec{y} = \vec{\widetilde{b}},$$

de sorte que

$$\vec{x} = \vec{y},$$

avec $\widetilde{A}$ une matrice triangulaire.

Algorithme de Gauss I

1. Étape 1 : on pose $A^{(1)} = A$.
2. Étape k : on appelle $A^{(k)}$ la matrice à l'étape k.

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{21}^{(1)} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \dots & \dots & \dots & \dots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & & \ddots & \ddots & & & & \vdots \\ \vdots & & & 0 & a_{kk}^{(k)} & a_{kk+1}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} \\ \vdots & & & \vdots & a_{k+1k}^{(k)} & a_{k+1k+1}^{(k)} & \dots & a_{k+1n}^{(k)} \\ \vdots & & & \vdots & a_{ik}^{(k)} & & & \\ 0 & & & 0 & a_{nk}^{(k)} & a_{nk+1}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}$$

L'étape k, consiste à éliminer la colonne k.

Algorithme de Gauss II (étape k)

Pour $i = k + 1$ à n faire

Début

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

Remplacer la ligne i :

$$L_i \leftarrow L_i - m_{ik} \times L_k$$

Fin

EXEMPLE

$$A = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ \boxed{-3} & -1 & 2 \\ \boxed{-2} & 1 & 2 \end{pmatrix} & \begin{array}{l} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{array} \end{array}$$

$m_{21} = \frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = -\frac{3}{2}$

$L_2 \leftarrow L_2 - m_{21}L_1 = L_2 + \frac{3}{2}L_1$

$m_{31} = \frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = \frac{-2}{2} = -1$

$L_3 \leftarrow L_3 - m_{31}L_2 = L_3 + L_2$

$$\begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix} & \begin{array}{c} L_1 \\ L_2 \leftarrow L_2 - \frac{3}{2}L_1 \\ L_3 \leftarrow L_3 + L_2 \end{array} \end{array}$$

EXEMPLE

$$\begin{array}{c} \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \boxed{2} & 1 \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{array}$$

$m_{32} = \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} = \frac{2}{\frac{1}{2}} = 4$

$L_3 \leftarrow L_3 - m_{32}L_2 = L3 - 4L_2$

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

L'algorithme d'élimination de Gauss pour obtenir un système échelonné peut s'écrire :

Algorithme 1 : Méthode de Gauss

```
Entrées : A, b⃗;
Sorties : Ã, b⃗̃;
Initialisation;
A^(1) ⟵ A;
b⃗^(1) ⟵ b⃗;
pour k = 1 à n − 1 faire
    pour i = k + 1 à n faire
        m_ik = a_ik / a_kk ;                        // (n-k) ⊘
        pour j = k à n faire
            a_ij = a_ij − m_ik a_kj ;               // (n-k)(n-k+1) ⊗ et ⊖
        fin
        b_i = b_i − m_ik b_k;
    fin
fin
```


REMARQUE

- En sortie, et sous réserve que $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ pour tout $k \in \{1, \dots, n-1\}$, on obtient un système triangulaire supérieur dont la solution est la même que celle de $A\vec{x} = \vec{b}$.
- La méthode fonctionne tant que pour tout $k \in \{1, \dots, n-1\}$ on a $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, i.e., les pivots sont non nuls.

Question : Quelles sont les conditions sur la matrice A pour avoir $a_{kk}^{(k)} \neq 0$?

DEFINITION

Une matrice A_k est dite sous matrice principale d'ordre k si

1. $A_k \in \mathcal{M}_k(\mathbb{R})$: matrice d'ordre k.
2. L'élément ij de A_k est défini par

$$(A_k)_{ij} = a_{ij}, \quad \text{pour } i, j \in \{1, \dots, k\}.$$

EXEMPLE

$$A = \begin{pmatrix} \boxed{2} & 1 & -1 \\ -3 & -1 & 2 \\ -2 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad A_1 = 2, \quad A_2 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -3 & -1 \end{pmatrix}, \quad A_3 = A.$$

Théorème 1

(i) Si toutes les sous-matrices principales A_k de la matrice A sont inversibles, alors, tous les pivots principaux $a_{kk}^{(k)}$ sont non nuls.

(ii) Si tous les pivots principaux sont non nuls, alors, toutes les sous-matrices A_k sont inversibles.

Preuve (Théorème 1)

On note par $A^{(k)}$ la matrice obtenue à la $k-$ième étape des manipulations de Gauss et on note par $A_i^{(k)}$ la sous-matrice d'ordre i de A_k.

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

Vu la structure des manipulations de Gauss, on a, pour tout $k \in \{1, \dots, n\}$

$$\det(A_k) = \det(A_k^{(k)}) = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \dots a_{kk}^{(k)} = \prod_{j=1}^{k} a_{jj}^{(j)}.$$

Par suite, $\det(A_k) \neq 0 \Leftrightarrow \forall j = 1, \dots, n, \quad a_{jj}^{(j)} \neq 0.$
En conclusion, la procédure de Gauss fonctionne ssi $\det(A_k) \neq 0, \quad \forall k = 1, \dots, n.$

Nombre d'opérations dans l'algorithme de Gauss I

On note N_{MD} le nombre de multiplications et de divisions intervenant dans l'algorithme et N_S le nombre de soustractions.

Pour chaque valeur de k,

- m_{ik} fait intervenir $n-k$ divisions.
- $a_{ij} - m_{ik}a_{kj}$, $(n-k)(n-k+1)$ multiplications, $(n-k)(n-k+1)$ soustractions.

On a donc

$$N_{MD} = \sum_{k=1}^{n-1} \left((n-k) + (n-k)(n-k+1)\right),$$
$$N_S = \sum_{k=1}^{n-1} \left((n-k)(n-k+1)\right).$$

Nombre d'opérations dans l'algorithme de Gauss II

$$\begin{aligned} N_{MD} &= \sum_{k=1}^{n-1} [(n-k) + (n-k)(n-k+1)] \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} [(n-k)(n-k+2)] \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} [n^2 - 2nk + k^2 + 2n - 2k] \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 + 2\sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} k^2 + 2\sum_{k=1}^{n-1} k \end{aligned}$$

Nombre d'opérations dans l'algorithme de Gauss III

$$\begin{aligned} N_S &= \sum_{k=1}^{n-1} [(n-k)(n-k+1)] \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \left[n^2 - 2nk + k^2 + n - k\right] \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 + \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} k^2 + \sum_{k=1}^{n-1} k \end{aligned}$$

Nombre d'opérations dans l'algorithme de Gauss IV

Or,

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n-1} k &= \frac{(1+n-1)(n-1)}{2} = \frac{(n-1)n}{2}, \\ \sum_{k=1}^{n-1} k^2 &= \frac{(n-1)(n-1+1)(2(n-1)+1)}{6} = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6}. \end{aligned}$$

En résumé,

$$\begin{aligned} N_{MD} &= \frac{2n(n-1)}{2} + \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} = \frac{2n^3+3n^2-5n}{6}, \\ N_S &= \frac{n(n-1)}{2} + \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} = \frac{n^3-n}{3}. \end{aligned}$$

Pour n grand, le nombre total de multiplications et de divisions dans le principe d'élimination de Gauss est d'environ $n^3/3$, tout comme le nombre total d'additions et de soustractions (cette complexité arithmétique est la même dans le cas de la résolution d'un système).

EXEMPLE

La quantité de calcul et le temps nécessaire augmentent avec n proportionnellement à n^3 :

n	N_{MD}	N_S
3	11	8
10	375	330
50	42875	41650
100	338250	333300
1000	3.3×10^8	3.3×10^8

REMARQUE

- En général, le temps nécessaire pour effectuer une multiplication ou une division sur un ordinateur est approximativement le même et est considérablement plus grand que celui nécessaire pour effectuer une addition ou une soustraction.

Motivation

Vu complexité de la méthode de Gauss, d'autres méthodes ont été développées.

Principe

Factoriser la matrice A de départ sous la forme : $A = LU$, avec

1. L : matrice triangulaire inférieure ;
2. U : matrice triangulaire supérieure.

Utilité

Le système linéaire $A\vec{x} = \vec{b}$ est équivalent à $LU\vec{x} = \vec{b}$, et la résolution se fait en deux étapes :

1. on pose $U\vec{x} = \vec{y}$ et on résout $L\vec{y} = \vec{b}$, puis
2. on résout $U\vec{x} = \vec{y}$.

i.e., la résolution de $A\vec{x} = \vec{b}$ revient à résoudre deux systèmes triangulaires (le 1er est inférieur et le suivant supérieur).

REMARQUE

- La résolution d'un système triangulaire supérieur ou inférieur nécessite un nombre d'opérations $O(n^2)$ chacun.

Exercice : calculer ce nombre (TD4) et déduire le nombre d'opérations nécessaires pour la résolution d'un système linéaire par la méthode de Gauss.

EXEMPLE

Comparaison du nombre approximatif d'opérations nécessaires à la détermination de la solution d'un système linéaire en utilisant Gauss vs LU.

n	$n^3/3$	$2n^2$	%Réduction
10	3.3×10^2	2×10^2	40
100	3.3×10^5	2×10^4	94
1000	3.3×10^8	2×10^6	99.4
10000	3.3×10^{11}	2×10^8	99.9

REMARQUE

- Comme le montre l'exemple, le facteur de réduction augmente considérablement avec la taille de la matrice.
- Sans surprise, les réductions obtenues par la factorisation ont un coût ; la détermination des matrices L et U nécessitent $O(n^3/3)$ opérations.
- Mais une fois la factorisatio n déterminée, les systèmes impliquant la matrice A peuvent être résolus pour un nombre quelconque de vecteurs b.

Question : Quelles sont les conditions sur A pour pouvoir la factoriser sous la forme $A = LU$?

Pour répondre à cette question, on revient sur l'algorithme de Gauss (en supposant qu'il peut s'appliquer au système $A\vec{x} = \vec{b}$).

Factorisation LU

- La première étape ($k = 1$) du processus d'élimination de Gauss consiste à réaliser, pour chaque $i = 2, \dots, n$ les opérations

$$L_i \leftarrow L_i - m_{i1} \times L_1$$

  où $m_{i1} = a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$.
- Ces opérations transforment le système en un système dans lequel toutes les entrées de la première colonne sous la diagonale sont nulles.
- On peut le reformuler d'une autre manière. Il est obtenu en multipliant la matrice originale A, à gauche, par la matrice $M^{(1)}$ (i.e, $A^{(2)} = M^{(1)}A^{(1)} = M^{(1)}A$) :

$$M^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -m_{21} & 1 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ -m_{n1} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

EXEMPLE I

$$A^{(1)} = A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ -3 & -1 & 2 \\ -2 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad A^{(2)} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} L_1 \\ L_2 \leftarrow L_2 + \frac{3}{2}L_1 \\ L_3 \leftarrow L_3 + L_1 \end{matrix}$$

$$A^{(2)} = M^{(1)}A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3/2 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ -3 & -1 & 2 \\ -2 & 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

```
A1 <- matrix(c(2,-3,-2,1,-1,1,-1,2,2),ncol = 3)
M1 <- diag(3)
M1[2,1] <- 3/2
M1[3,1] <- 1
M1%*%A1
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    2  1.0 -1.0
## [2,]    0  0.5  0.5
## [3,]    0  2.0  1.0
```

Factorisation LU

Le passage de l'étape k à l'étape $k+1$ peut s'interpréter de la même manière :

- on pose,

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

- on introduit la matrice

$$M^{(k)} = \begin{cases} M_{ii}^{(k)} = 1 & \forall i \in \{1, \ldots, n\} \\ M_{ik}^{(k)} = -m_{ik} & \forall k \in \{k+1, \ldots, n\} \\ M_{ij}^{(k)} = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

- Alors on a, $\forall k \in \{1, \ldots, n-1\}$:

$$A^{(k+1)} = M^{(k)} A^{(k)},$$

où $M^{(k)}$ génère les opérations sur lignes

$$L_i \leftarrow L_i - m_{ik} \times L_k, \quad \text{pour} \quad i = k+1, \ldots, n.$$

Factorisation LU

En général, avec $A^{(k)}\vec{x} = \vec{b}^{(k)}$ déjà formé, la multiplication par la $k-$ième matrice de transformation de Gauss $M^{(k)}$, nous donne

$$A^{(k+1)}\vec{x} = M^{(k)}A^{(k)}\vec{x} = M^{(k)} \cdots M^{(1)}Ax = M^{(k)}\vec{b}^{(k)} = \vec{b}^{(k+1)} = M^{(k)} \cdots M^{(1)}\vec{b}.$$

Le processus se termine avec la formation de $A^{(n)}\vec{x} = \vec{b}^{(n)}$, où $A^{(n)}$ est la matrice triangulaire supérieure:

$$A^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \ldots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \ldots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix},$$

i.e.

$$A^{(n)} = M^{(n-1)}M^{(n-2)} \cdots M^{(1)}A.$$

Cette procédure génère la matrice $U = A^{(n)}$ de la factorisation matricielle $A = LU$.

EXEMPLE II

$$A^{(2)} = M^{(1)}A^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}, A^{(3)} = \begin{array}{cl} \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{array}{l} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \quad \leftarrow L_3 - 4L_1 \end{array} \end{array}$$

$$A^{(3)} = M^{(2)}A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = U$$

$$U\vec{x} = A^{(3)}\vec{x} = M^{(2)}A^{(2)}\vec{x} = M^{(2)}M^{(1)}A\vec{x} = M^{(2)}M^{(1)}\vec{b} = \vec{b}^{(3)}.$$

Factorisation LU

- Ainsi, la matrice triangulaire supérieure U de la décomposition LU est donnée par

$$U = A^{(n)} = M^{(n-1)}M^{(n-2)} \ldots M^{(1)}A.$$

- Pour inverser les effets de cette transformation et revenir à $A^{(k)}$, on effectue, pour $i = k+1, \ldots, n$, les opérations

$$L_i \leftarrow L_i + m_{ik} \times L_k.$$

- Ceci est équivalent à multiplier par l'inverse de la matrice $M^{(k)}$, *i.e.*,

$$L^{(k)} = [M^{(k)}]^{-1} = \begin{cases} L_{ii}^{(k)} = 1 & \forall i \in \{1, \ldots, n\} \\ L_{ik}^{(k)} = +m_{ik} & \forall k \in \{k+1, \ldots, n\} \\ L_{ij}^{(k)} = 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Factorisation LU

- Par conséquent,

$$A = [M^{(1)}]^{-1}[M^{(2)}]^{-1}\dots[M^{(n-1)}]^{-1}A^{(n)}.$$

- La matrice triangulaire inférieure L dans la factorisation de A est le produit des matrices $L^{(k)}$

$$L = L^{(1)}L^{(2)}\cdots L^{(n-1)}$$

- On obtient

$$\begin{aligned} LU &= L^{(1)}\cdots L^{(n-1)}\cdot M^{(n-1)}M^{(n-2)}\cdots M^{(2)}M^{(1)}A \\ &= [M^{(1)}]^{-1}\cdots[M^{(n-1)}]^{-1}\cdot M^{(n-1)}\cdots M^{(2)}M^{(1)}A \\ &= A. \end{aligned}$$

REMARQUE

La factorisation LU existe ssi Gauss marche.

Théorème 2

Une matrice A admet une factorisation LU ssi : toutes les sous matrices principales A_k de la matrice A sont inversible,

Question : Est-ce que la décomposition LU est unique ?

LU unicité

- L'écriture $A = LU$: n^2 équations

$$A = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & \dots & 0 \\ L_{21} & L_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ L_{n1} & L_{n2} & \dots & L_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & \dots & U_{1n} \\ 0 & U_{22} & \dots & U_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & U_{nn} \end{pmatrix}$$

- le nombre d'inconnues est : $2 \times \frac{n(n+1)}{2} = n^2 + n$,
- n inconnues en plus.
- Pour avoir l'unicité de la décomposition, on impose n contraintes.
- De manière classique, on fait le choix suivant :

$$L_{11} = 1, L_{22} = 1, \dots, L_{nn} = 1.$$

i.e. pour tout $i \in \{1, \dots, n\}$

$$L_{ii} = 1.$$

Théorème 3

Sous les mêmes hypothèses que le Théorème 1,

(i) Il existe

1. une matrice triangulaire inférieure L, avec $L_{ii} = 1$, pour tout $i \in \{1, \dots, n\}$.
2. une matrice triangulaire supérieure U telle que

$$A = LU$$

(ii) De plus, une telle décomposition est unique.

EXEMPLE I

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ L_{21} & 1 & 0 \\ L_{31} & L_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{pmatrix}$$

1ère ligne de U :

$$1 \times U_{11} = a_{11} \Rightarrow U_{11} = a_{11}$$
$$1 \times U_{12} = a_{12} \Rightarrow U_{12} = a_{12}$$
$$1 \times U_{13} = a_{13} \Rightarrow U_{13} = a_{13}$$

Pour $j = 1$ à n : $U_{1j} = a_{1j}$.
1ère colonne de L :

$$L_{21} \times U_{11} = a_{21} \Rightarrow L_{21} = \frac{a_{21}}{U_{11}}$$
$$L_{31} \times U_{11} = a_{31} \Rightarrow L_{31} = \frac{a_{31}}{U_{11}}$$

EXEMPLE II

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ L_{21} & 1 & 0 \\ L_{31} & L_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{pmatrix}$$

2ème ligne de U :

$$L_{21}U_{12} + U_{22} = a_{21} \Rightarrow U_{22} = a_{22} - L_{21}U_{12}$$
$$L_{21}U_{13} + U_{23} = a_{23} \Rightarrow U_{23} = a_{23} - L_{21}U_{13}$$

2ème colonne de L :

$$L_{31}U_{12} + L_{32}U_{22} = a_{32} \Rightarrow L_{32} = \frac{1}{U_{22}}(a_{32} - L_{31}U_{12})$$

3ème ligne de U :

$$L_{31}U_{13} + L_{32}U_{23} + 1 \times U_{33} = a_{33} \Rightarrow U_{33} = a_{33} - (L_{31}U_{13} + L_{32}U_{23})$$

En général $LU = A$, donc pour tout $ij \in \{1, \dots, n\}$,

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} L_{ik} \times U_{kj}$$

Or L est triangulaire inférieure : $L_{ik} = 0$ pour $k > i$, i.e.,

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \sum_{k=1}^{i} L_{ik}U_{kj} \\ &= \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}U_{kj} + L_{ii} \times U_{ij} \\ &= \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}U_{kj} + U_{ij} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow U_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}U_{kj},$$

$$\Rightarrow L_{ji} = \frac{1}{U_{ii}}(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{jk}U_{ki}).$$

Ainsi, la résolution de $A\vec{x} = \vec{b}$ est équivalente à la résolution de deux systèmes triangulaires : $LU\vec{x} = \vec{b} \Leftrightarrow L\vec{y} = \vec{b}, \vec{y} = U\vec{x}$.

1. $L\vec{y} = \vec{b}$ (descente) : pour $i = 2$ à n ($y_1 = b_1$) :

$$y_i + \sum_{j=1}^{i-1} L_{ij}y_j = b_i \Rightarrow y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} L_{ij}y_j.$$

2. $U\vec{x} = \vec{y}$ (remontée) : $x_n = \frac{y_n}{U_{nn}}$, pour $j = n-1$ à 1 :

$$U_{ii}x_i + \sum_{j=1}^{i-1} U_{ij}y_j = y_i \Rightarrow x_i = \frac{1}{U_{ii}}(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} U_{ij}y_j).$$

REMARQUE

$U_{ii} \neq 0$ d'après le Théorème 2 (LU ssi tous les mineurs principaux sont non nuls, i.e. $\det(A_k) \neq 0, \forall k = 1, ..., n$, où A_k les matrices intermédiaires de la réduction de Gauss).

DEFINITION

Soit $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$. A est dite symétrique définie positive si :

1. $A^T = A$ (symétrique), i.e., $a_{ij} = a_{ji}, \forall\, i, j \in \{1, \ldots, n\}$;
2. $\vec{x}^T A\vec{x} \geq 0, \forall\, \vec{x} \in \mathbb{R}^n$ (positive), i.e., $\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j \geq 0, \forall\, \vec{x} \in \mathbb{R}^n$.
3. $\vec{x}^T A\vec{x} = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0} \in \mathbb{R}^n$ (A définie).
4. $\vec{x}^T A\vec{x} > 0, \forall\, \vec{x} \neq \vec{0} \in \mathbb{R}^n$ (définie positive).

Notation : $A \in S_n^{++}(\mathbb{R})$.

EXEMPLE I

Montrons que la matrice A suivante est définie positive.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Soit $\vec{x}$ un vecteur quelconque de $\mathbb{R}^3$.Alors

$$\begin{aligned} \vec{x}^T A\vec{x} &= \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2x_1 - x_2 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 \\ -x_2 + 2x_3 \end{pmatrix} \\ &= 2x_1^2 - x_1x_2 - x_1x_2 + 2x_2^2 - x_2x_3 - x_2x_3 + 2x_3^2 \\ &= 2x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_2x_3 + 2x_3^2. \end{aligned}$$

EXEMPLE II

En réarrangeant les termes, on obtient

$$\begin{aligned} \vec{x}^T A\vec{x} &= 2x_1^2 - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_2x_3 + 2x_3^2 \\ &= x_1^2 + (x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2) + (x_2^2 - 2x_2x_3 + x_3^2) + x_3^2 \\ &= x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2. \end{aligned}$$

Ce qui implique que, pour tout $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$ non nul,

$$\vec{x}^T A\vec{x} = x_1^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + x_3^2 > 0,$$

et $\vec{x}^T A\vec{x} = 0$ si $x_1 = x_2 = x_3 = 0$.

Théorème 4

Une matrice A est symétrique définie postive si et seulement si :

Toutes les sous-matrices A_k de A ($k = 1, \ldots, n$) sont aussi symétriques définies positives.

REMARQUE

$A \in S_n^{++}(\mathbb{R}) \Rightarrow A$ inversible (car : $A\vec{x} = \vec{0} \Leftrightarrow \vec{x}^T A\vec{x} = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0}$)

PREUVE

$\Rightarrow$ Soit $k \in \{1,\dots,n\}$. $A^T = A \Leftrightarrow a_{ij} = a_{ji}, \forall\, i,j \in \{1,\dots,n\}$
En particulier : $a_{ij} = a_{ji}, \forall\, i,j \in \{1,\dots,k\}$, i.e., $A_k^T = A_k$, i.e., A_k symétrique.

Montrons que $A_k \in S_n^{++}(\mathbb{R})$:
Soit $\vec{y} \in \mathbb{R}^k$. On complète $\vec{y}$ pour avoir un vecteur $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$: $\vec{x} = (y_1,\dots,y_k,0,\dots,0)^T$.
Comme $\vec{x}^T A \vec{x} = \vec{y}^T A_k \vec{y}$, $A \in S_n^{++}(\mathbb{R}) \Rightarrow \vec{x}^T A \vec{x} = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0}$, d'où
$\vec{y}^T A_k \vec{y} = 0 \Leftrightarrow \vec{y} = \vec{0}$, donc $A_k \in S_n^{++}(\mathbb{R})$.

$\Leftarrow$ Si $\forall k \in \{1,\dots,n\}$: $A_k \in S_n^{++}(\mathbb{R})$, alors pour $k = n$ on a $A = A_n \in S_n^{++}(\mathbb{R})$.

Conséquence du Théorème 4

Si $A \in S_n^{++}(\mathbb{R})$ alors $\forall\, k \in \{1,\dots,n\}, A_k \in S_n^{++}(\mathbb{R})$, donc

1. $\forall\, k \in \{1,\dots,n\}, A_k$ inversible, d'où
2. $A \in S_n^{++}(\mathbb{R})$: A admet une décomposition LU.

Théorème 5

Une matrice symétrique A est définie postive si et seulement si :

Toutes les sous-matrices A_k de A ($k = 1,\dots,n$) ont un déterminant positif.

EXEMPLE I

Dans cette exemple, nous avons montré que la matrice A suivante est définie positive en utilisant la définition.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Nous pouvons également le confirmer via le Théorème 5.

$$\det(A_1) = \det[2] = 2 > 0,$$

$$\det(A_2) = \det\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} = 4 - 1 = 3 > 0,$$

$$\det(A_3) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} = 2\det\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} + \det\begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = 6 - 2 = 4 > 0$$

Théorème de Cholesky

Si $A \in S_n^{++}(\mathbb{R})$, alors il existe une seule matrice L triangulaire inférieure à valeurs diagonales positives (mais pas nécessairement $= 1$) telle que

$$A = LL^T.$$

Algorithme de Cholesky

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & \dots & 0 \\ L_{21} & L_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & 0 \\ L_{n1} & L_{n2} & \dots & L_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{11} & L_{21} & \dots & L_{n1} \\ 0 & L_{22} & \dots & L_{n2} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & L_{nn} \end{pmatrix}$$

Pour tout $i, j \in \{1, \dots, n\}$ (L tri inf: $L_{ik} = 0$ pour $k > i$)

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} L_{ik} L_{kj}^T = \sum_{k=1}^{n} L_{ik} L_{jk} = \sum_{k=1}^{i} L_{ik} L_{jk} = \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik} L_{jk} + L_{ii} L_{ji}.$$

1er cas : $i = j$

$$L_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik} L_{ik}} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}^2}.$$

2e cas : $i \neq j$

$$L_{ij} = \frac{1}{L_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik} L_{jk} \right).$$

Algorithme 2 : Décomposition de Cholesky

Input : une matrice $A \in S_n^{++}(\mathbb{R})$ de taille $n \times n$
Output : une matrice triangulaire inférieure L de taille $n \times n$ telle que $A = LL^\top$

```
L_11 ← √a_11;
for j ← 2 to n do
    L_j1 ← a_j1 / L_11;
end
for i ← 2 to n − 1 do
    L_ii ← √(a_ii − Σ_{k=1}^{i−1} L_ik²);
    for j ← i + 1 to n do
        L_ji ← (a_ji − Σ_{k=1}^{i−1} a_jk L_ik) / L_ii;
    end
end
L_nn ← √(a_nn − Σ_{k=1}^{n−1} L_nk²);
return L;
```

Exercice : Quel est le nombre total de $\oplus$ $\ominus$ $\oslash$ $\otimes$ $\sqrt{}$?

REMARQUE

- Cholesky est deux fois plus rapide que LU pour résoudre des systèmes linéaires.
- Elle est utilisée par exemple dans les méthodes de simulation de Monte-Carlo.
- Elle intervient également dans le calcul de l'estimateur des moindres carrés ordinaires de β pour la régression linéaire multiple (comme $X^T X \in S_n^{++}(\mathbb{R})$ lorsque X est de rang plein)