Analyse Numérique

Décomposition LU

A. Godichon-Baggioni

I. Introduction et rappels

OBJECTIFS

Dans tout ce qui suit, on considère des vecteurs et matrices à valeurs dans $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ ou $\mathbb{C}$.

Résoudre :

$$Ax = b$$

avec

- $A = (a_{ij})_{1 \leq i,j \leq n}$ est une matrice carrée inversible
- b est un vecteur (réel ou complexe) de taille n
- x est une vecteur de taille n

Solution :

$$x = A^{-1}b.$$

Calcul de A^{-1} ?

Calcul de A^{-1} :

$$A^{-1} = \frac{1}{detA}(\mathrm{Com}A)^T$$

avec

$$\det A = \sum_{\sigma \in S_n} \epsilon(\sigma) a_{1\sigma(1)} \dots a_{n\sigma(n)}$$

et

$$(\mathrm{Com}A)_{ij} = (-1)^{i+j} \det A^{[ij]}$$

où $A^{[ij]}$ est la matrice A à laquelle on enlève la i-ème ligne et la j-ème colonne.

Temps de calcul

Par définition, calculer le déterminant de A implique de sommer sur toutes les permutations.

Nombre de permutations : Si a A est de taille n, il y a $n!$ permutations possibles.

Temps de calculs : Si $n = 20$, avec un processeur de 1 GHz, il faut 77 ans pour faire le calcul de l'inverse.

Aspects fondamentaux

1. Aspect théorique :
   1.1 Le problème a-t-il une ou plusieurs solutions ?
   1.2 Existe-t-il une solution préférable ?
   1.3 Comment varie qualitativement cette ou ces solutions quand b varie ?

2. Aspect pratique du problème :
   2.1 Comment trouve-t-on pratiquement cette solution ?
   2.2 Quelle est le coût algorithmique de la recherche de solution ?
   2.3 Le problème est-il stable d'un point de vue algorithmique ?

II. Normes de matrices et conditionnement

Norme

Soit E un espace vectoriel. Une norme sur E est une application

$$\|.\| : E \longmapsto \mathbb{R}_+$$

telle que

- $\|x\| = 0$ si et seulement si $x = 0$,
- $\|\lambda x\| = |\lambda|\|x\|$ pour tout $x \in E$, $\lambda \in \mathbb{K}$,
- $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ pour tout $x, y \in E$.

Exemples :

- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$.
- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2}$.
- $\|x\|_\infty = \max_{i=1,\ldots,n} |x_i|$.

Norme opérateur

Définition

Soit $\|\cdot\|$ une norme sur $\mathbb{K}^n$. La norme opérateur sur $M_n(\mathbb{K})$ associée à $\|\cdot\|$ est l'application

$$|||.||| : A \mapsto |||A||| = \sup_{x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \sup_{\substack{x \in \mathbb{K}^n \\ \|x\|=1}} \|Ax\|.$$

Proposition

Soit $\|\cdot\|$ une norme sur $\mathbb{K}^n$. Alors

1. *L'application $|||\cdot|||$ est une norme.*
2. *Pour tout $x \in \mathbb{K}^n$,*

$$\|Ax\| \leq |||A||| \|x\|.$$

3. *Pour tout $A, B \in M_n(\mathbb{K})$,*

$$|||AB||| \leq |||A||| |||B|||.$$

Exemples

Exemple 1 : (norme spectrale) La norme induite par la norme $\|\cdot\|_2$

$$\|A\|_2 = \sup_{\substack{x \in \mathbb{K}^n \\ \|x\|_2 = 1}} \|Ax\|_2.$$

Elle n'a pas de forme explicite mais

$$\|A\|_2^2 = \sup\{|\lambda|, \lambda \text{ valeur propre de } A^T A\}.$$

Exemple 2 : Les normes induites par les normes $\|\cdot\|_1$ et $\|\cdot\|_\infty$;

$$\|A\|_1 = \max\left\{\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|, 1 \leq j \leq n\right\},$$

et

$$\|A\|_\infty = \max\left\{\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|, 1 \leq i \leq n\right\}.$$

Norme de Frobenius

Exemple 3 : Norme euclidienne sur l'espace vectorielle $M_n(\mathbb{K})$ (vue comme $\mathbb{K}^{n^2}$ avec la base $(E_{kl})_{1\leq k,l\leq n}$ comme base orthonormée), donnée par

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{n} |a_{ij}|^2}.$$

Produit scalaire associé : pour tout $A, B \in M_n(\mathbb{K})$,

$$\langle A, B\rangle_F = \text{Trace}\left(A^T B\right).$$

Conditionnement d'une matrice

Définition

Soit $\|\cdot\|$ *une norme sur* $\mathbb{K}^n$ *et* $A \in GL_n(\mathbb{K})$*. Le conditionnement de* A *respectivement à* $\|\cdot\|$ *est défini par*

$$Cond(A) = |||A|||\,|||A^{-1}|||.$$

Proposition

Soit $A \in Gl_n(\mathbb{K})$ *et* $b, b' \in \mathbb{K}^n$*. Les solutions respectives* x *et* x' *de* $Ax = b$ *et* $Ax' = b'$ *satisfont l'erreur relative*

$$\frac{\|x - x'\|}{\|x\|} \leq Cond(A)\frac{\|b - b'\|}{\|b\|}.$$

III. Méthode de Gauss

Objectif

Transformer le système

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \dots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & & & & & = & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & \ddots & & & = & \vdots \\ a_{n1}x_1 & + & \dots & & & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{cases}$$

en un système triangulaire supérieur

$$\begin{cases} u_{11}x_1 & + & \dots & + & u_{1(n-1)}x_{n-1} & + & u_{1n}x_n & = & b'_1 \\ & & \ddots & & \vdots & & \vdots & = & \vdots \\ & & & & u_{(n-1)(n-1)}x_{n-1} & + & u_{(n-1)n}x_n & = & b'_{n-1} \\ & & & & & & u_{nn}x_n & = & b'_n \end{cases},$$

Méthode de Gauss

On prend $A^{(0)} = A$ et $b^{(0)} = b$. Pour tout $\ell = 1, \ldots, n-1$,

$$A^{(\ell)}[i,] = \begin{cases} A^{(\ell-1)}[i,] & \text{si } i \leq l \\ A^{(\ell-1)}[i,] - \frac{a_{i\ell}^{(\ell-1)}}{a_{\ell\ell}^{(\ell-1)}} A^{(\ell-1)}[\ell,] & \text{sinon.} \end{cases}$$

$$b_i^{(\ell)} = \begin{cases} b_i^{(\ell-1)} & \text{si } i \leq \ell, \\ b_i^{(\ell-1)} - \dfrac{a_{i\ell}^{(\ell-1)}}{a_{\ell\ell}^{(\ell-1)}} b_i^{(\ell-1)} & \text{si } i > \ell. \end{cases}$$

$\Rightarrow A^{(n-1)}, b^{(n-1)}$.

Dans tout ce qui suit, $\Delta_{i,\ell} = \frac{a_{i\ell}^{(\ell-1)}}{a_{\ell\ell}^{(\ell-1)}}$.

Exemple

On considère $Ax = b$ avec

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 5 & 0 \\ 6 & 7 & 1 \\ 3 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \qquad \text{et} \qquad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Méthode avec pivot

Problème de calculs : Que se passe-t-il si au temps ℓ, $a_{\ell\ell}^{(\ell-1)} = 0$?

Stabilité numérique : Prendre la ligne i_ℓ comme pivot avec

$$i_\ell = \operatorname{argmax}_{\ell \leq i \leq n} \left| a_{il}^{(\ell-1)} \right|$$

MÉTHODE AVEC PIVOT

On prend $A^{(0)} = A$ et $b^{(0)} = b$. Pour tout $\ell = 1, \ldots, n-1$,

$$A^{(\ell)}[i,] = \begin{cases} A^{(\ell-1)}[i,] & \text{si } i < \ell \\ A^{(\ell-1)}[i_\ell,] & \text{si } i = \ell \\ A^{(\ell-1)}[i,] - \Delta_{i,\ell} A^{(\ell-1)}[i_\ell,] & \text{si } i > \ell \text{ et } i \neq i_\ell \\ A^{(\ell-1)}[\ell,] - \Delta_{i,\ell} A^{(\ell-1)}[i_\ell,] & \text{si } i = i_\ell \end{cases}$$

$$b_i^{(\ell)} = \begin{cases} b_i^{(\ell-1)} & \text{si } i \leq \ell, \\ b_{i_\ell}^{(\ell-1)} & \text{si } i = \ell, \\ b_i^{(\ell-1)} - \Delta_{i,\ell} b_i^{(\ell-1)} & \text{si } i > \ell \text{ et } i \neq i_\ell \\ b_\ell^{(\ell-1)} - \Delta_{i,\ell} b_i^{(\ell-1)} & \text{si } i > \ell \text{ et } i = i_\ell \end{cases}$$

avec

$$\Delta_{i,\ell} = \frac{a_{\sigma(i)\ell}^{(\ell-1)}}{a_{i_\ell \ell}^{(\ell-1)}}$$

et

$$\sigma(\ell) = i_\ell, \sigma(i_\ell) = \ell \text{ et } \sigma(i) = i, i \notin \{\ell, i_\ell\}.$$

Exemple

On considère $Ax = b$ avec

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ -2 & -1 & 0 \\ 4 & 3 & -1 \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad b = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

IV. Décomposition LU

Décomposition PA = LU

Théorème (Décomposition $PA = LU$)

Soit A une matrice inversible de taille $n \geq 1$. Il existe une matrice de permutation P, une matrice triangulaire supérieure inversible U et une matrice triangulaire inférieure L avec des 1 sur la diagonale telles que

$$PA = LU.$$

Intérêt de la décomposition

- Résoudre $Ly = Pb$, puis $Ux = y$, on a alors $Ax = b$.
- Une fois la décomposition obtenue, $O(n^2)$ opérations pour résoudre le(s) système(s)
- Existence d'un P optimal pour que Cond(L) et cond(U) ne soient pas trop grands.

PREUVE DE LA DÉCOMPOSITION A=LU

Définition (Vecteurs et matrice de Gauss)

On rappelle que la ℓ-ième étape de la méthode de Gauss (sans pivot) peut s'écrire

$$A^{(\ell)}[i,] = \begin{cases} A^{(\ell-1)}[i,] & si\ i \leq \ell \\ A^{(\ell-1)}[i,] - \Delta_{i,\ell} A^{(\ell-1)}[\ell,] & si\ i > \ell \end{cases} \tag{1}$$

avec $\Delta_{i,\ell} = \frac{a_{i,\ell}^{(\ell-1)}}{a_{\ell\ell}^{(\ell-1)}}$*. Le vecteur de Gauss est défini par* $\tau_\ell = (0, \dots, 0, \Delta_{\ell+1,\ell}, \dots, \Delta_{n,\ell})^T$*. En notant* $\{e_1, \dots, e_n\}$ *la base canonique de* $\mathbb{K}^n$*, la matrice de Gauss associée est définie par*

$$M_\ell = I_n - \tau_\ell e_\ell^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & & & \\ 0 & \ddots & 0 & & & \\ \vdots & & 1 & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & -\Delta_{\ell+1,\ell} & \ddots & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ & & -\Delta_{n,\ell} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Preuve de la décomposition A=LU

Proposition

1. *La matrice M_ℓ est inversible et*

$$L_\ell := M_\ell^{-1} = I_n + \tau_\ell e_\ell^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & & & \\ 0 & \ddots & 0 & & & \\ \vdots & & 1 & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \Delta_{\ell+1,\ell} & \ddots & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ & & \Delta_{n,\ell} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

2. *Soient $M = M_{n-1}M_{n-2}\dots M_1$ et $L = L_1L_2,\dots L_{n-1}$, on a $LM = I_n$ et*

$$L = I_n + \sum_{\ell=1}^{n-1} \tau_\ell e_\ell^T = \begin{pmatrix} 1 & & \dots & & & \\ \Delta_{2,1} & \ddots & 0 & & & \\ \vdots & & 1 & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \Delta_{\ell+1,\ell} & \ddots & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ \Delta_{n,1} & & \Delta_{n,\ell} & \Delta_{n,\ell+1} & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Exemple

On considère $Ax = b$ avec

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 5 & 0 \\ 6 & 7 & 1 \\ 3 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \qquad \text{et} \qquad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

DÉCOMPOSITION PA = LU ET CONDITIONNEMENT

Décomposition A = LU

$$A = \begin{pmatrix} 0.0001 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 10000 & 1 \end{pmatrix}}_{=L} \underbrace{\begin{pmatrix} 0.0001 & 1 \\ 0 & 10000 \end{pmatrix}}_{=U}.$$

on a Cond(U) = 10^8.

Décomposition PA = LU

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=P} \underbrace{\begin{pmatrix} 0.0001 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=A} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0.0001 & 1 \end{pmatrix}}_{=L} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0.999 \end{pmatrix}}_{=U}$$

on a Cond(L) = 1.0001 et Cond(U) $\simeq$ 2.61.

Matrice de permutation

Définition

Une matrice de permutation 2 à 2 est définie par

$$P_{jk}[i,i] = 1 \quad si\ i \neq j,k$$
$$P_{jk}[i,i] = 0 \quad si\ i = j\ ou\ i = k$$
$$P_{jk}[i,i'] = 0 \quad si\ i \neq i'\ et\ ((i,i') \neq (j,k)\ ou\ (i,i') \neq (k,j)$$
$$P_{jk}[j,k] = P_{jk}[k,j] = 1$$

A titre d'exemple, on a

$$P_{24} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Matrice de permutation

- Pour toute matrice A, $P_{ij}A$ est la matrice A où l'on a permuté les i-ème et j-ème lignes.
- Pour toute matrice A, AP_{ij} est la matrice A où l'on a permuté les i-ème et j-ème colonnes.
- La patrice P_{ij} vérifie :

$$P_{ij} = P_{ij}^T = P_{ij}^{-1}.$$

Décomposition PA = LU

ℓ-ème opération dans la méthode de Gauss avec pivot :

$$A^{(\ell)} = M_\ell P^{(\ell)} A^{(\ell-1)}$$

où $P^{(\ell)}$ est la permutation, et M_ℓ est la matrice de Gauss

$$M_\ell = I_n - \tau_\ell e_\ell^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & & & \\ 0 & \ddots & 0 & & & \\ \vdots & & 1 & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & -\Delta_{\ell+1,\ell} & \ddots & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ & & -\Delta_{n,\ell} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

avec, si $P^{(\ell)} = P_{i_\ell \ell}$,

$$\Delta_{i,\ell} = \frac{a_{\sigma(i)\ell}^{(\ell-1)}}{a_{i_\ell \ell}^{(\ell-1)}}$$

DÉCOMPOSITION PA = LU

On a

$$U = M_{n-1}P^{(n-1)} \dots M_2 P^{(2)} M_1 P^{(1)} A.$$

Objectif : écrire sous la forme $U = L^{-1}PA$.

$$\begin{aligned}
U &= M_{n-1}P^{(n-1)}M_{n-2}P^{(n-2)} \dots M_1 P^{(1)} A \\
&= M_{n-1} \underbrace{P^{(n-1)}M_{n-2}P^{(n-1)}}_{=:\hat{M}_{n-2}} P^{(n-1)}P^{(n-2)}M_{n-3}P^{(n-3)} \dots \tilde{M}_1 P^{(1)} A \\
&= M_{n-1}\hat{M}_{n-2} \underbrace{P^{(n-1)}P^{(n-2)}M_{n-3}P^{(n-2)}P^{(n-1)}}_{=:\hat{M}_{n-3}} P^{(n-1)}P^{(n-2)}P^{(n-3)}M_{n-4} \dots M_1 P^{(1)} A \\
&\;\;\vdots \\
&= \hat{M}PA
\end{aligned}$$

avec $P = P^{(n-1)} \dots P^{(1)}$, $\hat{M} = M_{n-1}\hat{M}_{n-2} \dots \hat{M}_1$, où

$$\hat{M}_\ell = P^{(n-1)} \dots P^{(\ell+1)} M_\ell P^{(\ell+1)} \dots P^{(n-1)}.$$

DÉCOMPOSITION PA =LU

Inversion de $\hat{M}$:

$$\hat{M}_\ell = P^{(n-1)} \dots P^{(\ell+1)} M_\ell P^{(\ell+1)} \dots P^{(n-1)}.$$

On a

$$M_{(\ell)}^{-1} = L_\ell := I_n + \tau_\ell e_\ell^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & & & \\ 0 & \ddots & 0 & & & \\ \vdots & & 1 & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \Delta_{\ell+1,\ell} & \ddots & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ & & \Delta_{n,\ell} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Décomposition PA = LU

Proposition

On a

$$\hat{M}_\ell = I_n - P^{(n-1)} \dots P^{(\ell+1)} \tau_\ell e_\ell^T$$

et

$$\hat{M}_\ell^{-1} =: \hat{L}_\ell = I_n + P^{(n-1)} \dots P^{(\ell+1)} \tau_\ell e_\ell^T$$

$$L = \hat{M}^{-1} = \hat{L}_1 \dots \hat{L}_{n-2} L_{n-1} = I_n + \sum_{\ell=1}^{n-2} P^{(n-1)} \dots P^{(\ell+1)} \tau_\ell e_\ell^T + \tau_{n-1} e_{n-1}^T.$$

Pour résumer

L'obtention de la matrice U consiste en la matrice que l'on obtient avec la décomposition de Gauss avec pivot.

La matrice $P = P^{(n-1)} \dots P^{(1)}$ est le produit de toute les permutations effectuées pour obtenir U.

Construction de L : partir de la matrice identité, puis de manière itérative au temps ℓ :

1. Pour les $\ell - 1$ premières colonnes, appliquer la permutation $P^{(\ell)}$.
2. Remplir la ℓ-ème colonne avec les coefficients $\tau_{i,\ell}$.

EXEMPLES

Exemple 1 : On cherche à résoudre $Ax = b$ avec

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ -2 & -1 & 0 \\ 4 & 3 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad b = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Exemple 2 : On considère la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 17 & 10 \\ 2 & 4 & -2 \\ 6 & 18 & -12 \end{pmatrix}.$$