Opérations élémentaires, Décompositions de matrice, Orthonormalisation de Gram-Schmidt

1 Méthode de Gauss et décomposition LU

La décomposition LU est traitée en détail dans [Ciar] ou [Ser].
Soient K un corps et $A = (a_{i,j}) \in GL_n(K)$, une matrice inversible telle que les n sous matrice diagonales Δ_k, formée des k premières lignes et des k premières colonnes, soient inversibles. Alors A se décompose de manière unique en un produit LU où U (comme up) est une matrice triangulaire supérieure et L (comme low) est une matrice triangulaire inférieure.
En opérant sur les lignes de A, uniquement par des transvections, on la transforme en une matrice triangulaire supérieure U.
On utilise, pour faire apparaitre des 0 dans la première colonne, le coefficient $a_{11} \neq 0$ et la première ligne. Comme les opérations de la première étape ne change pas le rang des sous matrices diagonales, elles restent inversibles et l'algorithme continue de la même manière, en considérant la sous matrice inversible, obtenue en ne regardant pas la première ligne et la première colonne et ainsi de suite.
On peut, simultanément, agir sur la matrice unité de $GL_n(K)$. Par ces actions, la matrice unité se transforme en une matrice triangulaire inférieure. C'est en fait la matrice inverse de la matrice triangulaire inférieure L (comme law) dans la décomposition LU de A. On schématise souvent cet algorithme de la manière suivante :

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} a_{11} & \dots & a_{1n} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 1 & \dots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} & 0 & \dots & 1 \end{array}\right)$$
$$\downarrow$$
$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} u_{11} & \dots & u_{1n} & 1 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & u_{nn} & l'n1 & \dots & 1 \end{array}\right)$$

La matrice de gauche est $U = L^{-1}A$ et celle de droite est $L' = L^{-1}$.
Cette décomposition est unique. (voir [Ciar] page 84 ou [SER] page 90).

Si la matrice ne vérifie pas les hypothèses de la décomposition LU, si elle est simplement inversible, on peut, de manière analogue, en agissant sur ses lignes et celles de I, calculer son inverse, ([Art] page 17) ou la décomposer en produit de transvections et d'une dilatation. On montre ainsi que $GL_n(K)$

est engendré par les transvections et les dilatations.(voir [Gob] page 51 ou [ArnBert] page 249).

2 Décomposition LU et résolution d'un système linéaire

Pour résoudre un système, on agit de la même manière que pour LU simultanément sur le premier membre des équations (lignes de la matrice correspondante) et sur le second membre b (vecteur en colonne).
Si la matrice vérifie les hypothèses de la décomposition LU, on présente les calculs de la même manière.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} & b_n \end{array}\right)$$
$$\downarrow$$
$$\left(\begin{array}{ccc|c} u_{11} & \dots & u_{1n} & b'_1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & u_{nn} & b'_n \end{array}\right)$$

Le nouveau système a pour matrice U et pour second membre $b' = L^{-1}b$.

Si la matrice ne vérifie pas les hypothèses de la décomposition LU, le coefficient diagonal de la ième étape peut être nul.

- Si l'un des coefficients en dessous est différent de 0, on ajoute la ligne correspondante à la ligne i et l'on revient ainsi à l'algorithme précédent.
- Si tous les coefficients en dessous sont nuls, on ne fait rien. On passe à la sous matrice de taille inférieure.

La nouvelle matrice du système est alors échelonnée. (voir [Grif]) On résoud en commençant par la dernière équation et en remontant. Dans la résolution, "les grandes marches" correspondent à des variables libres. Par exemple, le système

$$\left\{\begin{array}{ccccccccc} x & + & 2y & + & z & & & = & 3 \\ & & & & z & + & t & = & 4 \\ & & & & & & 0 & = & a \\ & & & & & & 0 & = & 0 \end{array}\right.$$

admet des solutions si et seulement si $a = 0$. Dans ce cas on le résout en x et z, en fonction des variables libres y et t. Dans Grifone, les variables sont permutées pour reporter les variables libres en dernier. C'est peut-être plus simple pour expliquer la théorie, mais, dans la pratique, ce n'est pas utile.

3 LU et Cholesky

La décomposition de Cholesky est démontrée en détail dans [Ciar] ou [Ser].
Si $A \in GL_n(\mathbb{R})$ est une matrice symétrique définie positive (donc vérifiant les hypothèse pour la décomposition LU), il existe une unique matrice triangulaire inférieure, B, d'éléments diagonaux strictement positifs, telle que A se décompose en $A = BB^t$.
On utilise la décomposition LU. L'idée est de "diviser" U par sa diagonale $U = DU_1$. Cette matrice diagonale D, avec l'hypothèse, A définie positive, est à coefficients strictement positifs. On en extrait la racine carrée D_1. On obtient : A égale au produit de deux matrices triangulaires : LD_1 et D_1U_1.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \dots & 1 & 0 \\ \dots & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{u_{11}} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{u_{ii}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{u_{nn}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{u_{11}} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{u_{ii}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{u_{nn}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \dots & \dots \\ 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} \sqrt{u_{11}} & 0 & 0 \\ \dots & \sqrt{u_{ii}} & 0 \\ \dots & \dots & \sqrt{u_{nn}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{u_{11}} & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{u_{ii}} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{u_{nn}} \end{pmatrix}$$

L'unicité de la décomposition LU permet de prouver que ces deux matrices sont transposées l'une de l'autre ([Ciar] page 87 ou [Ser] page 96 première méthode). C'est la décomposition de Cholesky :

$$A = BB^t = LDL^t$$

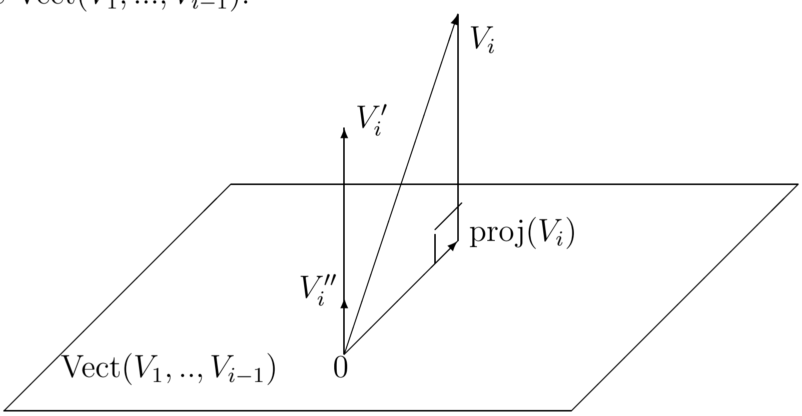
Cette démonstration algorithmique n'a pour le moment qu'un intérêt théorique puisque, dans la pratique, on recherche directement la matrice B en résolvant les équations non linéaires, $BB^t = A$. Ce calcul n'est pas constitué d'opérations élémentaires puisqu'il introduit, à chaque étape, des racines carrées.
(voir [Ciar] page 88 et 89 et [Ser] page 96, deuxième méthode).

4 LU et l'orthonormalisation de Gram - Schmidt

Soit E un espace euclidien de dimension finie n et $(V_i)_{i=1..n}$ une base de E. Soit A la matrice du produit scalaire $< \, , \, >$ de E dans cette base.
Considérons alors la décomposition LU de cette matrice. Comme A est définie positive, elle admet une décomposition de Cholesky :

$$A = BB^t = LDL^t$$

Mais alors $L^{-1}AL^{-1^t} = D$ est la matrice du produit scalaire dans une base orthogonale $(V_1', ..., V_n')$ et la transposée de L^{-1} est la matrice de passage. Ainsi, on peut lire dans les colonnes de la transposée de L^{-1}, c'est à dire dans les lignes de L^{-1}, obtenue par la méthode de Gauss, les composantes des $(V_i')_{i=1..n}$ dans la base $(V_1...V_n)$.
Compte tenu de la matrice L' on voit que $V_i' = V_i + \sum_{k=1}^{i-1} l'_{i,k} V_k$. On en déduit, pour tout i, $\text{Vect}(V_1, ..., V_i) = \text{Vect}(V_1', ..., V_i')$.
Les opérations effectuées sur les lignes de $A = (< V_i, V_j >)_{i=1..n}$, pour obtenir U, peuvent s'interpréter en disant que les coefficients de U sont les produits scalaires $< V_i', V_j >$.
Comme U est triangulaire supérieure, on en déduit que V_i' est dans l'orthogonal de $\text{Vect}(V_1, ..., V_{i-1})$.



On reconnait donc le procédé géométrique de Gramm-Schmidt : V_i' se déduit de V_i en lui soustrayant sa projection orthogonale sur $\text{Vect}(V_1, .., V_{i-1})$.

$$\text{proj}(V_i) = -\sum_{k=1}^{i-1} l'_{i,k} V_k$$

La triangulation simultanée selon les lignes de A et de I, décrite dans le premier paragraphe donne tous les résultats de l'orthonormalisation de Gram-Schmidt.

Dans les lignes de L^{-1}, obtenue par la méthode de Gauss, on lit les composantes des $(V_i')_{i=1..n}$ dans la base $(V_1...V_n)$.
De plus, la nouvelle matrice du produit scalaire, D, contient les normes aux carrés des vecteurs de la base, $(\|V_1'\|^2, .., \|V_n'\|^2)$. On les lit sur la diagonale de U.
Pour obtenir la base orthonormée, il suffit de diviser chaque ligne de $L' = L^{-1}$ par la racine carré du coefficient diagonal correspondant de U.

5 Décomposition QR et décomposition d'Iwasawa

Voir [Ser] page 96, [MNE,Test] page 44 et le problème 1998 de mathématiques générales .
Soit M une matrice de $GL_n(\mathbb{R})$ alors

1. $M = QR$ où Q est une matrice orthogonale, R une matrice triangulaire supérieure à coefficient diagonaux strictement positifs.
2. $M = KD_1T$ (décomposition d'Iwasawa) où K est une matrice orthogonale, D_1 une matrice diagonale à coefficient strictement positifs et T une matrice triangulaire supérieure avec des 1 sur la diagonale.

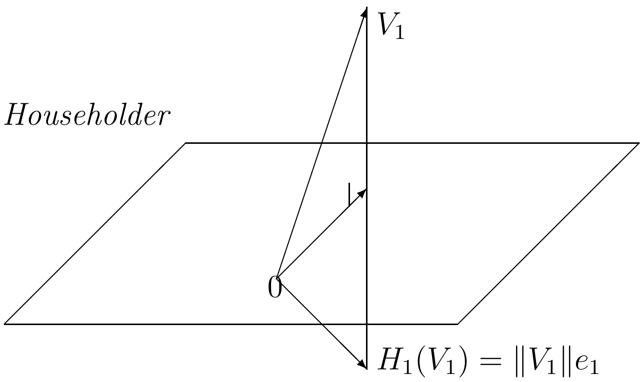
Interprétons M comme la matrice de n vecteurs colonnes, donnés par leur coordonnées, constituant une base de $\mathbb{R}^n$, $(V_1, .., V_n)$. On calcule la matrice de Gramm des V_i : $A = (< V_i, V_j >)_{i=1..n}$. Par l'algorithme de Gauss sur A et I, on obtient les deux matrices U et L' qui permettent de calculer une base orthogonale $(V_1', .., V_n')$, puis orthonormée $(V_1'', .., V_n'')$. Les relations $V_i' = V_i + \sum_{k=1}^{i-1} l'_{i,k} V_k$ montrent qu'on obtient la matrice des V_i' en opérant sur les colonnes de M, c'est à dire en multipliant M, à droite, par la matrice triangulaire supérieure L'^t dont l'inverse sera noté T. Puis on agit encore sur les vecteurs colonne pour les diviser par leur norme. Si on pose

$$D_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{u_{11}} & \dots & 0 \\ \dots & \sqrt{u_{ii}} & \dots \\ 0 & \dots & \sqrt{u_{nn}} \end{pmatrix}.$$

la racine carrée de la diagonale de U et $R = D_1T$, on obtient la matrice $K = Q = MT^{-1}D_1^{-1}$, orthogonale, puisque les vecteurs colonnes forment la base orthonormée $(V_1'', .., V_n'')$. on a $M = QR = KD_1T$. C'est la décomposition QR et la décomposition d'Iwasawa.
Dans la pratique, la décomposition QR se calcule par une autre méthode, avec des matrices de Householder (voir [Ciar] page90).
L'idée est encore géométrique. Soit $(e_1, ..., e_n)$ la base orthonormée canonique de $\mathbb{R}^n$. On envoie le premier vecteur colonne V_1 de M sur $\|V_1\|e_1$ par une symétrie orthogonale dont la matrice H_1 est une matrice de Householder.

Ainsi $H_1 M$ a pour première colonne $\|V_1\| e_1$.

H_1 : *Matrice de Householder*



On continue avec la matrice de taille inférieure obtenue en supprimant la première ligne et la première colonne. On obtient :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix} H_1 M = \begin{pmatrix} \|V_1\| & \dots & \dots \\ 0 & \|V_2\| & \dots \\ 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}$$

.

et ainsi de suite. On obtient, en n étapes, une matrice triangulaire R, à diagonale positive, et $M = H_1^{-1} \dots H_n^{-1} R = QR$. On trouvera des détails pratiques sur cette méthode dans [Ciar] page 90.

Références

[ArnBert] J.M.Arnaudiès, J.Bertin Groupes Algèbres et Géométrie , Ellipes.

[Art] M.Artin, Algebra, Prentice Hall. (on y trouve tout sur les modules sur A euclidien, les réseaux,... , etc, avec de bons dessins)

[Ciar] P.G.Ciarlet, Introduction à l'analyse numérique et à l'optimisation, Masson.(toutes les décompositions classiques avec leur complexité).

[Gob] R.Goblot, Algèbre linéaire, Scientifika. (de nombreuses remarques intéressantes, précis sur les $K[X]$-modules et les invariants de similitude).

[Grif] J.Grifone, Algèbre linéaire, Cepadues.(bon livre de premier cycle avec des opérations élémentaires).

[Mne,Tes] R.Mneimné, F.Testard, Introduction à la théorie des groupes de Lie classiques, Hermann. (utile pour de nombreux résultats, notamment topologiques, sur les matrices : voir 0.6 page 5)

[Ser] D.Serre Les Matrices, Dunod.("synthèse" du Ciarlet avec, en plus, module sur A principal).