Méthodes de Cholesky et de Thomas

Le but de cette séance est d'étudier des factorisations qui ne s'appliquent qu'à des matrices de forme particulière (SDP ou tridiagonales) mais qui ont l'avantage d'avoir un coût réduit (en temps machine) par rapport à la factorisation LU. Vous trouverez sur la page Moodle du cours un notebook squelette pour démarrer ce TP.

1 Méthode de Cholesky pour les matrices symétriques définies positives

On considère la factorisation de Cholesky pour une matrice A symétrique définie positive :

$$A = H^{\mathsf{T}} H$$

où H est une matrice triangulaire supérieure. On rappelle que les éléments h_{ij} de H^{T} peuvent être calculés à partir des formules suivantes : $h_{11} = \sqrt{a_{11}}$ et, pour tout, $i = 2, \ldots, n$,

$$h_{i1} = \frac{1}{h_{11}} a_{i1} \tag{1a) \{?\}$$

$$h_{ij} = \frac{1}{h_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} h_{ik} h_{jk} \right) \qquad j = 2, \ldots, i-1, \tag{1b) \{?\}$$

$$h_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} h_{ik}^2}. \tag{1c) \{?\}$$

1) Ouvrir le notebook `TP5squelette.ipnyb` et examiner l'amorce de la programmation de la fonction `Cholesky` qui est proposée. Quels sont les tests préalables qui sont effectués ?
2) Compléter la fonction `Cholesky(A)` pour obtenir en sortie la matrice triangulaire inférieure L telle $A = LL^{\mathsf{T}}$. On vérifiera à chaque étape que la matrice en entrée est définie positive.
3) Calculer la factorisation de Cholesky de la matrice de Hilbert $A = H(5) \in \mathbb{R}^{5,5}$, et vérifier que la matrice A coïncide avec le produit des deux facteurs aux erreurs d'arrondis près. Expliquer pourquoi la matrice suivante n'admet pas de factorisation de Cholesky :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 5 & 6 & 7 \\ 3 & 6 & -1 & 8 \\ 4 & 7 & 8 & -3 \end{pmatrix},$$

   et vérifier que cela est bien détecté par la fonction `Cholesky` développée au point 1).
4) Utiliser la factorisation de Cholesky et les fonctions `descente` et `remontee` du TP précédent (dont la correction est disponible sur la page Moodle du cours) pour résoudre le système linéaire $Ax = b$ avec

$$A = H(5), \qquad b = (1, 1, 1, 1, 1)).$$

2 Méthode de Thomas pour les matrices tridiagonales

Pour certaines matrices dotées d'une structure particulière la factorisation LU peut être obtenue avec un nombre d'opérations élémentaires significativement inférieur à celui de la méthode de Gauss. C'est le cas notamment des matrices tridiagonales de la forme

$$A = \text{tridiag}(c, a, b),$$

où $a \in \mathbb{R}^n$ et c, $b \in \mathbb{R}^{n-1}$. On supposera dans le reste de cette section que A est définie positive, ce qui assure la bonne définition de tous les termes qui apparaissent dans l'algorithme.

Pour toute matrice tridiagonale définie positive de la forme (2) on a

$$A = LU, \quad L = \text{tridiag}(\gamma, 1, 0), \quad U = \text{tridiag}(0, \alpha, b),$$

avec $\alpha \in \mathbb{R}^n$ et $\gamma \in \mathbb{R}^{n-1}$. On vérifie aisément que

$$LU = \begin{pmatrix} \alpha_1 & b_1 & \\ \gamma_i\alpha_{i-1} & \gamma_i b_{i-1} + \alpha_i & b_i \\ & \gamma_n\alpha_{n-1} & \gamma_n b_{n-1} + \alpha_n \end{pmatrix}$$

Les composantes des vecteurs α et γ peuvent être calculées par comparaison de manière récursive selon le schéma suivant :

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & & b_1 & & \\ \downarrow & & & & \\ \gamma_i\alpha_{i-1} & \rightarrow & \gamma_i b_{i-1} + \alpha_i & & b_i \\ & & \downarrow & & \\ & & \gamma_n\alpha_{n-1} & \longrightarrow & \gamma_n b_{n-1} + \alpha_n \end{pmatrix}$$

Plus précisément on a $\alpha_1 = a_1$ et, pour $2 \leq i \leq n$,

$$\gamma_i = \frac{c_i}{\alpha_{i-1}}, \qquad \alpha_i = a_i - \gamma_i b_{i-1}.$$

1) Vérifier que le nombre d'opérations élémentaires nécessaires pour calculer les facteurs L et U est de l'ordre de $3n$.
2) Programmer une fonction `Thomas` en complétant le début de la fonction proposée sur le squelette.
3) Utiliser la fonction `Thomas` pour résoudre le système linéaire suivant avec $n = 100$:

$$A = (n+1)^2\,\text{tridiag}(-1, 2, -1), \qquad b = (1, 1, \ldots, 1),$$

avec n entier positif.