Résolution de systèmes linéaires

A la fin du chapitre, l'étudiant doit **être capable de** :

- 1. Faire la distinction entre méthode directe et itérative
- 2. Faire la distinction entre problème mal posé (pas de solution) et méthode peu robuste aux erreurs de troncature (solution imprécise)
- 3. Décrire l'algorithme de Gauss pour la résolution des systèmes linéaires
- Justifier et décrire l'algorithme de Cholesky pour la résolution des systèmes SDP
- 5. Donner l'ordre de grandeur du nombre d'opérations nécessaire à la résolution d'un système de grande taille, à l'inversion d'une matrice de grande taille
- 6. Décrire les algorithmes de Jacobi et de Gauss-Seidel
- Faire un choix éclairé entre les méthodes du cours pour la résolution d'un problème donné

Equation matricielle

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{11} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Système de *n* équations linéaires

Ecriture matricielle AX=B

Ecritures indicielles

En général,
$$a_{ij}$$
 et b_i connus; x_i inconnus...

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} = b_{i} \quad i=1,...n \quad \text{ou } a_{ij} x_{j} = b_{i}$$

Méthodes Directes – Méthodes itératives

Méthode Directe:

- on calcule « la » solution en une « fois ». En arithmétique exacte, on obtient la solution exacte
- Gauss, Cholesky

Méthode Itérative:

- on calcule la solution comme la limite d'une suite de vecteurs. Même en arithmétique exacte, le nombre d'itérations restant fini, on n'atteind jamais la solution exacte
- Jacobi, Gauss-Seidel

Méthodes Directes

Méthode de substitution de Gauss

Conditions d'utilisation : méthode applicable pour tout système n × n

Principe: triangularisation de la matrice A + balayage

- « On ne change pas la solution d'un système linéaire si :
 - on multiplie tous les termes d'une équation par une constante non nulle.
 - si l'on remplace une équation par la somme, membre à membre de cette équation et d'une autre équation du système. »

On utilise ces propriétés pour triangulariser!

$$\begin{bmatrix} a_{ij} \\ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_j \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_i \\ \end{bmatrix}$$

Application de la méthode à un exemple 3×3 :

Triangularisation étape 0

$$E_{1}^{(0)} \begin{cases} a_{11}^{(0)} x_{1} + a_{12}^{(0)} x_{2} + a_{13}^{(0)} x_{3} = b_{1}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} x_{1} + a_{22}^{(0)} x_{2} + a_{23}^{(0)} x_{3} = b_{2}^{(0)} \\ a_{31}^{(0)} x_{1} + a_{32}^{(0)} x_{2} + a_{33}^{(0)} x_{3} = b_{3}^{(0)} \end{cases}$$

Elimination des termes en x_1 dans E_2 et E_3 ...

$$-\frac{a_{21}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} \times E_{1}^{(0)} + E_{2}^{(0)} = E_{2}^{(1)}$$

$$= \underbrace{etape 1} \qquad E_{1}^{(0)} \begin{cases} a_{11}^{(0)} x_{1} + a_{12}^{(0)} x_{2} + a_{13}^{(0)} x_{3} = b_{1}^{(0)} \\ a_{22}^{(1)} x_{2} + a_{23}^{(1)} x_{3} = b_{2}^{(1)} \end{cases}$$

$$-\frac{a_{31}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} \times E_{1}^{(0)} + E_{3}^{(0)} = E_{3}^{(1)} \qquad E_{3}^{$$

Elimination du terme en x_2 dans E_3 ...

$$-\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \times E_2^{(1)} + E_3^{(1)} = E_3^{(2)} \text{ étape 2} \qquad E_2^{(1)}$$

$$-\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \times E_2^{(1)} + E_3^{(1)} = E_3^{(2)} \text{ étape 2}$$

$$E_1^{(0)} \begin{cases} a_{11}^{(0)} x_1 + a_{12}^{(0)} x_2 + a_{13}^{(0)} x_3 = b_1^{(0)} \\ a_{11}^{(0)} x_1 + a_{12}^{(0)} x_2 + a_{13}^{(0)} x_3 = b_1^{(0)} \end{cases}$$

$$E_1^{(0)} \begin{cases} a_{11}^{(0)} x_1 + a_{12}^{(0)} x_2 + a_{13}^{(0)} x_3 = b_1^{(0)} \\ a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 = b_2^{(1)} \end{cases}$$

$$E_1^{(0)} \begin{cases} a_{11}^{(0)} x_1 + a_{12}^{(0)} x_2 + a_{13}^{(0)} x_3 = b_1^{(0)} \\ a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 = b_2^{(1)} \end{cases}$$

$$E_1^{(0)} \begin{cases} a_{11}^{(0)} x_1 + a_{12}^{(0)} x_2 + a_{13}^{(0)} x_3 = b_1^{(0)} \\ a_{22}^{(1)} x_2 + a_{23}^{(1)} x_3 = b_2^{(1)} \end{cases}$$

Balayage:

$$\begin{cases} x_1 = \left(b_1^{(0)} - a_{12}^{(0)} x_2 - a_{13}^{(0)} x_3\right) / a_{11}^{(0)} \\ x_2 = \left(b_2^{(1)} - a_{23}^{(1)} x_3\right) / a_{22}^{(1)} \\ x_3 = b_3^{(2)} / a_{33}^{(2)} \end{cases}$$

Définition importante

Les termes diagonaux par lesquels il est nécessaire de diviser lors de l'étape de balayage ($a_{11}^{(0)}, a_{22}^{(1)}, a_{33}^{(2)}$) sont appelés **pivots**

On verra plus tard qu'ils jouent un rôle très particulier ...

cas général

Étape
$$(r-1): A^{(r-1)}X = B^{(r-1)}$$

$$A^{(r-1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1r-1}^{(0)} & a_{1r}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2r-1}^{(1)} & a_{2r}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{r-1r-1}^{(r-2)} & a_{r-1r}^{(r-2)} & \cdots & a_{r-1n}^{(r-2)} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{rr}^{(r-1)} & \cdots & a_{rn}^{(r-1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & a_{nr}^{(r-1)} & \cdots & a_{nn}^{(r-1)} \end{bmatrix}$$

$$B^{(r-1)} = \begin{bmatrix} b_{2} \\ \vdots \\ b_{r-1}^{(r-2)} \\ \vdots \\ b_{n}^{(r-1)} \end{bmatrix}$$

Formules de Gauss:

étape r-1

$$a_{ij}^{(r)} = a_{ij}^{(r-1)} - \frac{a_{ir}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}} a_{rj}^{(r-1)} \quad (r+1 \le i, j \le n)$$

$$b_{i}^{(r)} = b_{i}^{(r-1)} - \frac{a_{ir}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}} b_{r}^{(r-1)} \quad (r+1 \le i \le n)$$

Étape (n-1):
$$A^{(n-1)}X = B^{(n-1)}$$

$$A^{(n-1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1r-1}^{(0)} & a_{1r}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2r-1}^{(1)} & a_{2r}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{r-1r-1}^{(r-2)} & a_{r-1r}^{(r-2)} & \cdots & a_{r-1n}^{(r-2)} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{rr}^{(r-1)} & \cdots & a_{rn}^{(r-1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

$$B^{(n-1)} = \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_r^{(r-2)} \\ b_r^{(r-1)} \\ \vdots \\ b_n^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

$$x_{r} = \frac{1}{a_{rr}^{(r-1)}} \left(b_{r}^{(r-1)} - \sum_{j=r+1}^{n} a_{rj}^{(r-1)} x_{j} \right) \quad 1 \le r \le n-1$$

On cherche à résoudre :
$$\mathbf{AX} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & -6 & 0 \\ -2 & 7 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ -2 \\ 9 \end{bmatrix} = \mathbf{b}$$
 par la méthode de Gauss

Partant de A quelconque, on obtient donc une matrice triangulaire supérieure U et un système UX=c qui se résout facilement par substitution

Comment passer de A à U?

La première étape consiste à enlever 2 fois la première ligne à la deuxième. Sous forme matricielle cela s'écrit:

On écrit :
$$L_2 \leftarrow L_2 - 2L_1$$
: $\begin{bmatrix} 1 \\ -2 & 1 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & -6 & 0 \\ -2 & 7 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 & 1 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ -2 \\ 9 \end{bmatrix}$ soit : $\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -8 & -2 \\ -2 & 7 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ -12 \\ 10 \end{bmatrix}$

La matrice
$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 & 1 \\ & 1 \end{bmatrix}$$
 est une matrice élémentaire qui remplace la ligne L_2 par L_2 - $2L_1$

De même la matrice
$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ 1 & & 1 \end{bmatrix}$$
 est une matrice élémentaire qui remplace la ligne L_3 par $L_3 + L_1$

et la matrice
$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & 1 & 1 \end{bmatrix}$$
 est une matrice élémentaire qui remplace la ligne L_3 par $L_3 + L_2$

Au final on passe de **A** à **U** en combinant les opérations élémentaires dans le bon ordre:

$$U = GFEA$$

Les mêmes opérations sont appliquées sur le membre de droite donc:

$$c = GFEb$$

Après avoir écrit le système à partir de la matrice **U**, est-on capable de revenir à la forme initiale écrite à partir de **A** ? Oui bien sûr, en appliquant les transformations élémentaires inverses.

Par exemple, l'opération associée à la matrice E est annulée par l'opération qui consiste à remplacer L_2 par $L_2 + 2 L_1$. La matrice élémentaire correspondante est simplement:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ +2 & 1 \\ & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 & 1 \\ & & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \mathbf{E}^{-1}$$

En procédant de même pour les matrices élémentaires F et G, on obtient au final:

$$\mathbf{E}^{-1}\mathbf{F}^{-1}\mathbf{G}^{-1}\mathbf{U} = \mathbf{A}$$

$$E^{-1}F^{-1}G^{-1}c = b$$

Le produit des matrices élémentaires inverses a deux propriétés très importantes:

- 1. Elle est triangulaire inférieure
- 2. Ses coefficients contiennent l'information sur les <u>transformations</u> <u>élémentaires</u> permettant de passer de **U** à **A**

Le produit des matrices élémentaires inverses est souvent noté **L** de sorte que:

$$A = LU$$
 $Lc = b$

Factorisation LU et résolution de systèmes linéaires

La réécriture de toute matrice carrée **A** comme le produit d'une matrice triangulaire inférieure **L** et d'une matrice triangulaire supérieure **U** a de très nombreuses applications en algèbre linéaire. Cette opération porte le nom de factorisation **LU**

Partant d'un système linéaire **AX=b**, elle permet d'obtenir deux systèmes:

L'intérêt réside dans le fait que les matrices **L** et **U** étant triangulaires, ces deux systèmes peuvent être résolus très simplement par substitution directe (pour **LY=b**) ou inverse (pour **UX=Y**)

La résolution de AX=b se fait alors en deux étapes:

- 1. Résolution de LY=b qui donne Y,
- 2. Résolution de **UX=Y** qui donne **X** une fois **Y** connu

Factorisation LU ou LDU

La factorisation **LU** est non symétrique dans le sens où:

- 1. L, triangulaire inférieure, contient des « 1 » sur sa diagonale,
- 2. U, triangulaire supérieure, contient les pivots sur sa diagonale

C'est la raison pour laquelle on préfère parfois écrire la matrice A sous la forme:

A=LDU'

où les diagonales de **L** et **U'** ne contiennent que des 1 et **D** est une matrice diagonale dont les éléments sont les pivots.

Evidemment cette écriture affecte les coefficients de la matrice **U** dont la ième ligne doit être divisée par le ième pivot (lien entre **U** et **U**'):

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/3 & 1 \\ 1/3 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 4/3 & 8/3 \\ & & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/3 & 1 \\ 1/3 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 4/3 \\ & & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2/3 & 1/3 \\ & 1 & 2 \\ & & & 1_{15} \end{bmatrix}$$

Matrice singulière

Les factorisations **LU** et **LDU** sont équivalentes (au sens de l'information qu'elles contiennent) **SAUF** lorsque la matrice **A** est singulière

Dans ce cas, un pivot (au moins) est égal à 0 et la factorisation **LDU** n'existe plus alors que **LU** est toujours bien définie (rien n'empêche **U** d'avoir un zéro sur sa diagonale ...)

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/3 & 1 \\ 1/3 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 4/3 & 8/3 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{LU}$$

Dans ce cas, la factorisation **LU** ne peut évidemment pas être utilisée pour résoudre le système linéaire **AX=b** puisque le système **UX=Y** n'admet pas de solution unique.

Ce n'est pas une faiblesse de la méthode, c'est que le problème posé (résoudre **AX=b**) n'admet pas de solution unique

- Même lorsque la matrice A n'est pas singulière, la méthode de substitution de Gauss (ou factorisation LU, c'est la même chose) peut ne pas donner de bons résultats en précision finie
- <u>Exemple</u>: On suppose que l'on calcule avec une précision de 10-3 et que l'on veut résoudre le système suivant:

$$\begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \text{ dont la solution th\'eorique est : } \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/(1-10^{-4}) \\ (1-2\times10^{-4})/(1-10^{-4}) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1.0001 \\ 0.9999 \end{bmatrix}$$

Appliquer la méthode directement conduit au système triangulaire:

$$L_2 \leftarrow L_2 - 10^4 L_1 \text{ d'où } \begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 0 & -9999 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -9998 \end{bmatrix}$$

Avec une erreur de troncature de 10-3, on obtient en fait:

$$0-10000y = -10000$$
 soit $y = 1$, résultat valable à 10^{-3} près

 Avec y=1 (proche de 0.9999), le processus de substitution inverse donne alors pour x:

$$10^{-4}x + 1 = 1$$
 soit $x = 0$, très éloigné de 1.0001 !!!

- Autrement dit, le fait d'utiliser un pivot « petit » conduit à une très grande sensibilité du résultat aux erreurs de troncature
- Remarques:
 - 10⁻³ est énorme pour une troncature, mais pas pour une donnée expérimentale
 - Pour des problèmes de grande taille, une erreur de 10⁻¹⁵ peut conduire à une grande sensibilité des résultats
 - Ce problème a une solution: le « partial pivoting »

- Lorsqu'il s'agit de résoudre un système linéaire, l'ordre d'écriture des équations n'influence pas le résultat ... sauf en précision finie !!
- Exemple: On suppose que l'on calcule avec une précision de 10-3 et que l'on veut résoudre le système suivant:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-4} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}, \text{ dont la solution th\'eorique est : } \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/(1-10^{-4}) \\ (1-2\times10^{-4})/(1-10^{-4}) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1.0001 \\ 0.9999 \end{bmatrix}$$

Appliquer la méthode directement conduit au système triangulaire:

$$L_2 \leftarrow L_2 - 10^{-4} L_1 \text{ d'où } \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 - 10^{-4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 - 10^{-4} \end{bmatrix}$$

Avec une erreur de troncature de 10-3, on obtient en fait:

$$0+y=+1$$
 soit $y=1$, résultat valable à 10^{-3} près

 Avec y=1 (proche de 0.9999), le processus de substitution inverse donne alors pour x:

$$x+1=2$$
 soit $x=1$, proche de 1.0001

- Autrement dit, le fait d'utiliser un pivot « grand » conduit à une très faible sensibilité du résultat aux erreurs de troncature
- En termes de matrices, échanger les lignes du système linéaire revient à multiplier à gauche par une matrice de permutation

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-4} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Factorisation LU avec pivotage partiel

- A chaque étape de substitution, on cherche dans les lignes à traiter le plus grand pivot en valeur absolue
- Autrement dit, les formules de Gauss données précédemment pour l'étape r-1 sont appliquées après avoir placé en position r la ligne i_{max} dont le premier coefficient est tel que

$$|a_{i_{\max}r}^{(r-1)}| = \max_{r \le i \le n} |a_{ir}^{(r-1)}|$$

• En termes matriciel, chaque permutation entre les lignes r et i_{max} revient à multiplier à gauche le système linéaire par une matrice de permutation fabriquée à partir de la matrice identité en échangeant les lignes r et i_{max}:

$$\mathbf{AX} = \mathbf{b} \to \mathbf{PAX} = \mathbf{Pb} \text{ avec } \mathbf{P} \text{ telle que} \begin{cases} P_{r,i_{\max}} = P_{i_{\max},r} = 1 \\ P_{i,i} = 1 \text{ si } i \neq r \text{ et } i \neq i_{\max} \\ P_{ij} = 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

21

Nombre d'opérations pour résoudre un système linéaire

- On compte le nombre d'opérations arithmétiques
- Factorisation LU (ou élimination de Gauss) d'une matrice de taille n:
 - À l'étape k, il faut annuler n-k coefficients en dessous du pivot Pour chacune des lignes entre k + 1 et n cela nécessite :
 - 1 division par le pivot pour calculer a_{ik} / a_{kk}
 - n-k multiplications/soustractions pour effectuer $L_i \leftarrow L_i a_{ir}^{(r-1)} / a_{rr}^{(r-1)} L_r$ Pour les n-k lignes on obtient donc (n-k)(n-k+1) opérations
 - Pour la totalité des étapes on arrive donc à :

$$\sum_{k=1}^{n} (n-k)(n-k+1) = \sum_{k=1}^{n} k^2 - (2n+1) \sum_{k=1}^{n} k + n(n+1) \sum_{k=1}^{n} 1$$

$$= \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} - (2n+1) \frac{n(n+1)}{2} + n^2(n+1)$$

$$= \frac{n^3}{3} - \frac{n}{3} \approx \frac{n^3}{3}$$

Nombre d'opérations pour résoudre un système linéaire

 Le terme de droite doit également être manipulé à chaque étape de la substitution. Un calcul similaire conduit à

$$\sum_{k=1}^{n} (n-k) = n \sum_{k=1}^{n} 1 - \sum_{k=1}^{n} k = n^{2} - \frac{n(n+1)}{2} \approx \frac{n^{2}}{2}$$

 Une fois le système triangularisé, il faut utiliser une substitution inverse pour obtenir la solution

Pour chacune des lignes k entre n et 1 cela nécessite :

- n-k multiplications/soustractions
- 1 division par le pivot

Pour l'ensemble des lignes (des inconnues) on obtient :

$$\sum_{k=1}^{n} n - k + 1 = n^{2} - \frac{n(n+1)}{2} + n = \frac{n^{2}}{2} + \frac{n}{2} \approx \frac{n^{2}}{n \to \infty}$$

Nombre d'opérations pour inverser une matrice

 Inverser une matrice revient à résoudre n fois le même système linéaire avec n membres de droite différents (les n vecteurs de la base canonique):

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & \vdots & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 3 & \vdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \longrightarrow \longrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \vdots & 3/2 & -1 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 & \vdots & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & -1/2 & 0 & 1/2 \end{bmatrix}$$

$$A \longrightarrow I \longrightarrow I \longrightarrow A^{-1}$$

- C'est la méthode de Gauss-Jordan
- Le compte des opérations est le suivant:

$$\underbrace{\text{élimination}}_{\substack{\frac{n^3}{3}}} + \underbrace{n \text{ termes de droite}}_{\substack{n \times \frac{n^2}{2}}} + \underbrace{n \text{ substitutions inverses}}_{\substack{n \times \frac{n^2}{2}}} \approx \frac{4}{3}n^3$$

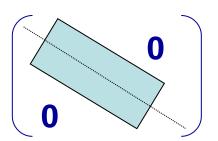
qui peut être ramené à n^3 opérations en prenant en compte la présence de zéros. En tous les cas il est clair que d'un point de vue numérique:

Remarques

1 – La méthode de GAUSS (ou LU) est aussi utilisée pour le calcul du déterminant de A :

$$\det(A) = a_{11}^{(0)}.a_{22}^{(1)}\cdots a_{nn}^{(n-1)}$$

2 –la méthode de GAUSS (ou LU) peut être optimisée pour les matrices bandes. Par exemple, pour une matrice tri-diagonale, on montre que le nombre d'opérations nécessaire pour résoudre le système peut être réduit à O(n) (au lieu de $O(n^3)$ dans le cas général ...)



Méthode de Cholesky

conditions d'utilisation

Il faut que la matrice A soit symétrique définie positive (SDP).

A symétrique :
$$a_{ij} = a_{ji}, \forall i, j, (ou A^T = A)$$

A définie :
$$AX = 0 \Rightarrow X = 0 \text{ (det } A \neq 0)$$

A positive :
$$\forall X \neq 0, X^T AX > 0$$

En fait, ces conditions ne sont pas si restrictives car pour pouvoir résoudre AX=B, il faut que A^{-1} existe et donc que det A soit non nul. Si A n'est pas symétrique et positive, il suffit de réécrire le problème sous la forme :

$$A^{\mathsf{T}}AX = A^{\mathsf{T}}B$$

 A^* B^*

$$A^*$$
 est symétrique: $A^{*T} = (A^T A)^T = A^T A = A^*$
 A^* est positive: $X^T A^* X = X^T A^T A X = (AX)^T (AX) = ||AX||^2 > 0$

Méthode de Cholesky

 Lorsque A est symétrique la factorisation LDU peut prendre une forme particulière : A = LDU = A^t = U^tDL^t d'où U^t = L et L^t = U et donc :

$$A = LDL^{t}$$

- Par théorème, si **A** est définie positive alors toutes ses valeurs propres sont positives et tous ses pivots sont positifs. On en déduit que **D** peut s'écrire $\mathbf{D} = \Delta \Delta = \Delta \Delta^{t}$
- La décomposition A = LDL^t donne alors: A = LΔΔ^tL^t = LΔ(LΔ)^t
- Au final, si les conditions SDP sont respectées alors on obtient la factorisation de Cholesky:

Si A est SDP, alors il existe une matrice L telle que : $A = LL^{t}$

 Une fois la factorisation LL^t effectuée, la méthode de résolution est identique à celle utilisée avec la factorisation LU:

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









L'équation AX = B peut être réécrite sous la forme :

$$LL^TX = B$$

Si on pose : $Y = L^T X$ alors on peut résoudre en deux balayages successifs (c'est le fameux double balayage de Choleski !!) :

$$LY = B$$



$$Y \downarrow = B$$

Le 1^{er} balayage donne Y

$$L^T X = Y$$





Le 2^{ème} balayage donne X

- Comme pour la méthode d'élimination de Gauss (factorisation LU), la principale difficulté de la méthode est de déterminer les coefficients l_{ij} de la matrice L à partir des coefficients a_{ij} de A.
- Exemple : dans le cas d' un système 3 x 3, on doit avoir :

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

Soit à résoudre le système non linéaire suivant :

$$\begin{cases} I_{11}^2 = a_{11} \\ I_{21}I_{11} = a_{21} \\ I_{31}I_{11} = a_{31} \\ I_{21}^2 + I_{22}^2 = a_{22} \\ I_{31}I_{21} + I_{32}I_{22} = a_{32} \\ I_{31}^2 + I_{32}^2 + I_{33}^2 = a_{33} \end{cases}$$

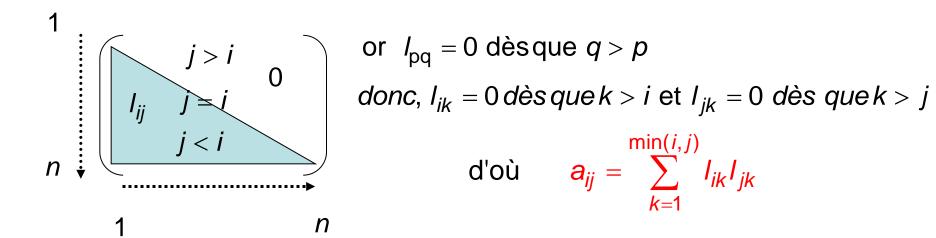
Pas de problème pour calculer les I_{ii} I = 1,2,3 car on sait que la diagonale de L est positive...

6 équations à 6 inconnues

$$\begin{cases} I_{11} = \sqrt{a_{11}} \\ I_{21} = a_{21} / \sqrt{a_{11}} \\ I_{31} = a_{31} / \sqrt{a_{11}} \\ I_{22} = \sqrt{a_{22} - \frac{a_{21}^2}{a_{11}}} \\ A_{32} = \frac{a_{32} - \frac{a_{21}a_{31}}{a_{11}}}{\sqrt{a_{22} - \frac{a_{21}^2}{a_{11}}}} \\ I_{33} = \sqrt{a_{33} - \frac{a_{21}^2}{a_{11}} - \frac{a_{31}^2}{a_{11}}} \end{cases}$$

Cas général

on a:
$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} I_{ik} I_{kj}^{T} = \sum_{k=1}^{n} I_{ik} I_{jk}$$



Les indices i et j concernés correspondent au triangle inférieur :

$$1 \le j \le n$$

$$j \le i \le n$$
donc le min(i, j) = j

En suivant la méthode de résolution mise en place sur l'exemple 3×3, si I'on se place en j = r: tous les I_{ij} $(1 \le j \le r - 1 \text{ et } j \le i \le n)$ sont connus.

En fait les *l*_{ii} où *i<j* sont nuls !!

Or
$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} I_{ik} I_{jk}$$

Si
$$j = r$$
, $a_{ir} = \sum_{k=1}^{r-1} I_{ik} I_{rk} + I_{ir} I_{rr}$, $j \le i \le n$

*si
$$i = j = r$$
, $a_{rr} = \sum_{k=1}^{r-1} I_{rk} I_{rk} + I_{rr}^2$

$$I_{rr} = \sqrt{a_{rr} - \sum_{k=1}^{r-1} I_{rk}^2}$$

*si
$$i > r$$
, $a_{ir} = \sum_{k=1}^{r-1} I_{ik} I_{rk} + I_{ir} I_{rr}$

$$I_{ir} = \frac{1}{I_{rr}} \left(a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} I_{ik} I_{rk} \right)_{3r}$$

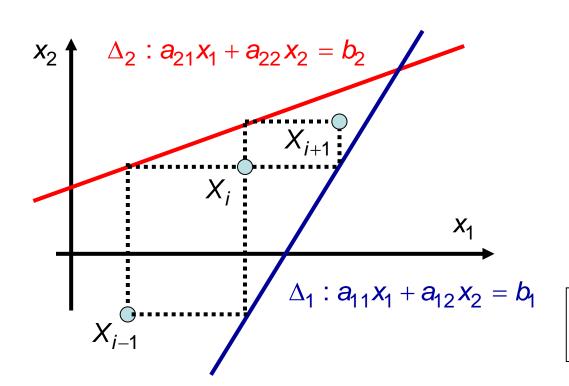
Remarques

- La méthode de Cholesky est moins générale que la factorisation LU puisqu'elle n'est applicable qu'aux atrices SDP.
- On montre que le nombre d'opérations nécessaires à la résolution d'un système linéaire de taille n est de l'ordre de n³/6, soit environ 2 fois moins que pour la méthode générale LU
- 3. <u>Un autre avantage</u>: la méthode de Cholesky est très robuste numériquement, peu sensible aux erreurs de troncature. Le pivotage est en pratique beaucoup moins nécessaire pour qu'il ne l'est pour l'élimination de Gauss.
- 4. Même divisé par 2, le nombre d'opérations reste proportionnel au cube de la taille du système à résoudre. Cela devient très problématique lorsque *n* est de l'ordre de 10⁶, ...,10⁹ comme on le rencontre en calcul intensif ... Il faut trouver autre chose!

Méthodes Itératives

Méthode de Jacobi

Cas d'un système 2×2
$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \end{cases}$$



$$\begin{cases} x_1^{(i+1)} = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12} x_2^{(i)} \right) \\ x_2^{(i+1)} = \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - a_{21} x_1^{(i)} \right) \end{cases}$$

On utilise, pour calculer x_2 , l'ancienne valeur de x_1 .

$$X_0 \to X_1 \to \cdots \to X_i \to \cdots$$

Critère d'arrêt Critère de convergence

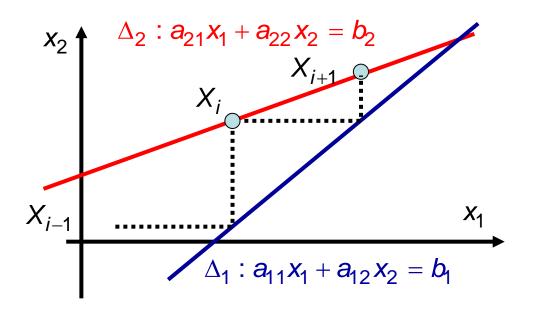
Méthode de Jacobi

Généralisation aux systèmes nxn

Convergence:
$$\|X^{(k+1)} - X^{(k)}\| < \varepsilon$$

Méthode lente, mais très facile à programmer

Cas d'un système 2×2
$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \end{cases}$$



$$\begin{cases} x_1^{(i+1)} = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12} x_2^{(i)} \right) \\ x_2^{(i+1)} = \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - a_{21} x_1^{(i+1)} \right) \end{cases}$$

On utilise, pour calculer x_2 , la valeur de x₁ réactualisée.

Généralisation aux systèmes nxn

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots & AX = B \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Passage de
$$\chi^{(k)} \rightarrow \chi^{(k+1)}$$

Généralisation aux systèmes nxn

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - \sum_{j=2}^n a_{1j} x_j^{(k)} \right) & i = 1 \\ \dots & \text{ligne } i = 2 \dots \\ x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) \\ \dots & \text{ligne } i = n-1 \dots \\ x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{nn}} \left(b_n - \sum_{j=1}^{n-1} a_{nj} x_j^{(k+1)} \right) & x^{(k+1)} = \mathcal{L} x^{(k)} + H \quad i = n \end{cases}$$

Conditions de convergence

On va chercher à montrer que : $X^{(k+1)} = L X^{(k)} + H$

On pose pour cela : $\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{E} - \mathbf{F}$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \cdots & 0 \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn-1} & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \cdots & \cdots & a_{n-1n} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$-E$$

Conditions de convergence

La méthode de Gauss-Seidel s'écrit avec ces notations :

$$\begin{cases} a_{11} x_1^{(k+1)} = b_1 - \sum_{j=2}^n a_{1j} x_j^{(k)} \\ \dots & \text{ligne } i = 2 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^i a_{ij} x_j^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \\ \dots & \text{ligne } i = n-1 \end{cases}$$

$$\sum_{j=1}^n a_{nj} x_j^{(k+1)} = b_n$$

$$(D-E)X^{(k+1)}=FX^{(k)}+B$$

$$X^{(k+1)} = \underbrace{(D-E)^{-1}F}_{\mathcal{L}}X^{(k)} + \underbrace{(D-E)^{-1}B}_{\mathcal{H}}$$

Conditions de convergence

Prenons alors comme vecteur X initial

$$X^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{alors} : \quad \begin{vmatrix} X^{(1)} = H \\ X^{(2)} = [1 + \mathcal{L}]H \\ \vdots \\ X^{(k+1)} = [1 + \mathcal{L} + \dots + \mathcal{L}^{k}]H \end{vmatrix}$$

La suite des X(k) sera convergente si la suite matricielle converge

Conditions de convergence

Théorème 1: une condition **nécessaire et suffisante** de convergence d'une méthode itérative (ici G.-S.) est que le rayon spectral de la matrice \mathcal{L} associée soit inférieur à 1.

$$\rho(\mathcal{L}) < 1$$
 avec $\rho = \sup_{i=1,...,n} |\lambda_i|$ valeur propre

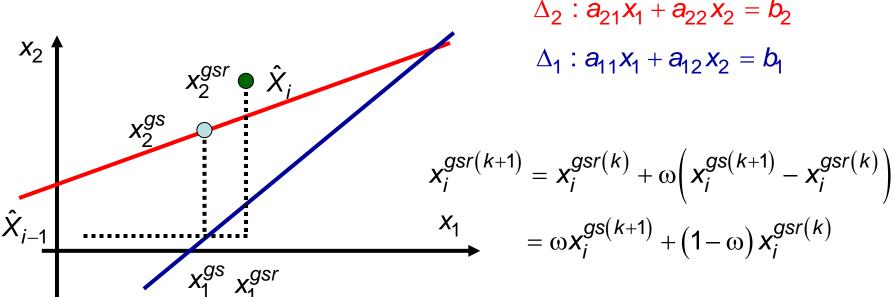
Remarque : peu d'intérêt en pratique car la recherche des valeurs propres est un problème plus complexe que la résolution du système.

Théorème 2: une condition **suffisante** de convergence d'une méthode itérative (ici G.S.) est que la matrice **A** soit à « diagonale dominante ».

$$\left|a_{ii}\right| \ge \sum_{\substack{j=1\\j \ne i}}^{N} \left|a_{ij}\right| \text{ pour } 1 \le i \le n$$

Relaxation

- La méthode de relaxation a déjà été utilisée pour la recherche de racine de fonctions
- Elle est appliquée ici pour la résolution de systèmes linéaires, avec Gauss-Seidel ...



44

Condition de convergence

Pour toute matrice **A**, le rayon spectral de la matrice de la méthode de relaxation \mathcal{L}_{ω} est supérieur ou égal à $|1-\omega|$.

En d'autres termes, une condition **nécessaire** de convergence de la méthode de relaxation est que :

 $0<\omega<2$

 $\omega > 1$: sur relaxation

 ω < 1: sous relaxation

Attention !! Une condition nécessaire de convergence n'est pas une condition suffisante !
Le fait que ω vérifie la condition n'assure en rien la convergence de la méthode.

Par contre si ω ne vérifie pas la condition, alors là, on est sûr de diverger...



Comparaison des méthodes directes (MD) et itératives (MI)

Rapidité d'exécution	Le compte des opérations est en général largement inférieur pour les MI que pour les MD, au moins pour les systèmes de grande taille [O(n) contre O(n³)].	
Facilité de	Equivalente pour les MI et les MD	
mise en oeuvre		
Validité des résultats	Systèmes dégénérés	Les MI permettent, sous certaines conditions, d'obtenir une solution y compris pour les systèmes singuliers, ce qui n'est pas le cas pour les MD (det A = 0)
	Convergence	La définition du critère d'arrêt est un problème complexe qui ne se pose que pour les MI.
	Précision	Les effets dévastateurs de la propagation des erreurs peuvent être évités que ce soit avec les MD ou avec les MI. Evidemment, pour les systèmes mal conditionnés, le problème peut ne pas avoir de bonne solution.
Conclusion	En général, les MD sont à préférer aux MI lorsque le choix est possible (systèmes de taille modérée ($O(10^3)$): elles sont plus fiables et l'on sait que l'on obtiendra la solution à coup sûr. Toutefois, les MI sont souvent les seules possibles pour la résolution de systèmes issus de la discrétisation d'EDP Ces systèmes sont très creux et de taille 46 potentiellement énorme ($O(10^8)$).	

Qualité numérique

- En précision finie, les réels sont définis à une erreur de troncature près
- L'erreur de troncature peut se propager et s'amplifier considérablement durant l'algorithme de recherche des valeurs propres
- Ce problème a déjà été observé pour la résolution des systèmes linéaire et avait justifié l'introduction du pivotage partiel dans la méthode de Gauss
- De même, les incertitudes sur les données (coefficients de la matrice de départ) conduisent à des incertitudes sur la solution obtenue
- Pour une matrice et un problème donnés, il est utile de connaître la manière dont l'incertitude sur les données d'entrée se convertit pour la solution

- On suppose que **A** est symétrique définie positive et que ses valeurs propres sont telles que: $0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_n$
- On suppose que B est connue à une incertitude près δB. On note alors δX l'incertitude correspondante sur la solution X
- On obtient alors: $A(X + \delta X) = B + \delta B$, et donc $\delta X = A^{-1}\delta B$
- Le problème est alors d'autant plus mal conditionné que l'erreur relative sur X est grande devant l'erreur relative sur B. Il est donc utile de comparer les quantités ||δX||/||X|| et ||δB||/||B||

- L'erreur sur X est d'autant plus grande par rapport à δB que δB est aligné avec la direction propre de A-1 associée avec la plus grande valeur propre de A-1, soit 1/λ₁,
- La solution X est d'autant plus petite par rapport à B que B est aligné avec la direction propre de A-1 associée avec la plus petite valeur propre de A-1, soit 1/λ_n,
- Au final, on obtient la majoration suivante:

$$\frac{\|\mathbf{\delta X}\|/\|\mathbf{X}\|}{\|\mathbf{\delta B}\|/\|\mathbf{B}\|} \le \frac{\lambda_n}{\lambda_1} = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$$

• Pour une matrice SDP, le rapport $\lambda_{max}/\lambda_{min}$, est le conditionnement de la matrice

 Pour le cas d'une matrice quelconque il faut tout d'abord introduire la notion de norme d'une matrice

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}$$

- On rappelle alors que : $\mathbf{B} = \mathbf{A}\mathbf{X}$ et $\mathbf{\delta}\mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{\delta}\mathbf{B}$
- D'où l'on déduit : $\|\mathbf{B}\| \le \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{X}\|$ et $\|\mathbf{\delta}\mathbf{X}\| \le \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{\delta}\mathbf{B}\|$
- La majoration recherchée est alors simplement:

$$\frac{\left\|\mathbf{\delta X}\right\|/\left\|\mathbf{X}\right\|}{\left\|\mathbf{\delta B}\right\|/\left\|\mathbf{B}\right\|} \leq \left\|\mathbf{A}\right\|\left\|\mathbf{A}^{-1}\right\|$$

Lorsque l'incertitude vient de la matrice elle-même, on part de:

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B} \text{ et } (\mathbf{A} + \delta \mathbf{A})(\mathbf{X} + \delta \mathbf{X}) = \mathbf{B}$$

Et on obtient après quelques calculs:

$$\delta \mathbf{X} = -\mathbf{A}^{-1} \delta \mathbf{A} (\mathbf{X} + \delta \mathbf{X})$$

En termes de normes cela donne :

$$\left\| \boldsymbol{\delta} \mathbf{X} \right\| \leq \left\| \mathbf{A}^{-1} \right\| \left\| \boldsymbol{\delta} \mathbf{A} \right\| \left\| \mathbf{X} + \boldsymbol{\delta} \mathbf{X} \right\|$$

D'où l'on déduit :

$$\frac{\left\|\delta \mathbf{X}\right\|/\left\|\mathbf{X}+\delta \mathbf{X}\right\|}{\left\|\delta \mathbf{A}\right\|/\left\|\mathbf{A}\right\|} \leq \left\|\mathbf{A}\right\|\left\|\mathbf{A}^{-1}\right\|$$

• Le conditionnement $\|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\|$ est donc pertinent pour le problème $\mathbf{AX} = \mathbf{B}$ quelque soit le type de perturbation

Calcul pratique de la norme de A

- La définition de la norme de A ne donne pas directement un mode de calcul de cette quantité car il est exclus de trouver le maximum sur l'ensemble de tous les vecteurs non nuls ...
- On utilise donc l'astuce suivante:

$$\|\mathbf{A}\| = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \implies \|\mathbf{A}\|^2 = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|^2}{\|\mathbf{x}\|^2} \implies \|\mathbf{A}\|^2 = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^t \mathbf{x}}$$

- Il s'agit donc de maximiser le produit scalaire de x et de A^tAx. Le maximum recherché est atteint pour x = v_{max}, où v_{max} est le vecteur propre de A^tA associée à sa plus grande valeur propre λ_{max}.
- Au final, la norme de A est la racine carrée de la plus grande valeur propre de A^tA. C'est aussi la plus grande valeur singulière de A.

Quelques références à consulter sans modération

- 1. Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur Patrick Lascaux, Raymond Théodor, 1. Méthodes directes
- Linear Algebra and its applications, Fourth Edition, Gilbert Strang
- 3. Numerical Recipes. The art of scientific computing, W. Press, S. Teukolsky, W. Wetterling and B. Flannery