MAT 6470/6473. TP4: Factorisations QR et systèmes sur-déterminés.

(Adapté de *Scientific Computing, an introductory survey*, M.T. Heath., exercice 3.28, p.151 et exercice 3.12, p.155)

À remettre au plus tard à 21h00 le 29 février 2024 - un rapport par mini-groupe, électroniquement par StudiUM. TOUS vos scripts MATLAB devraient être remis par StudiUM.

Soit une matrice $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ de rang n, avec $m \geq n$. Désignons la $k$ième colonne de A par $\boldsymbol{a}_k$. Dans ce TP on propose de calculer une factorisation QR (réduite ou complète) avec plusieurs méthodes différentes et d'évaluer la qualité des résultats obtenus.

- Méthode A: factorisation de Cholesky: $A^T A = LL^T$ où L est une matrice triangulaire inférieure (voir les cours 5 et 5b pour le code MATLAB `cholesky.m`.)
- Méthode B: Gram-Schmidt classique (voir l'algorithme 0, ci-dessous) pour la factorisation QR réduite.
- Méthode C: Gram-Schmidt modifiée pour la factorisation QR réduite (voir les cours 5 et 5b pour le code MATLAB `mgs.m`).
- Méthode D: Rotations de Givens.
- Méthode E: Transformations de Householder.

Notes Importantes:

- Méthode D: Écrire <u>*vous-même*</u> un script MATLAB `[Q,R] = givensQR(A)` qui pourrait être utilisée pour calculer une factorisation complète QR ($A = QR$) de la matrice A en utilisant des rotations de Givens. (Utiliser la forme (30) des notes de cours pour le calcul de c et de s).
- Méthode E: Écrire <u>*vous-même*</u> un script MATLAB `[Q,R] = hhold(A)` qui pourrait être utilisée pour calculer une factorisation complète QR ($A = QR$) de la matrice A en utilisant des transformations de Householder.
- N'utiliser que les substitutions arrière (et aussi, pour la méthode A, avant) pour obtenir les solutions des systèmes linéaires obtenus avec les méthodes A à E.

Questions

1. Supposons qu'on choisit $\boldsymbol{b} := A\boldsymbol{x}$ pour un certain vecteur $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$. Supposer aussi que la solution numérique $\widehat{\boldsymbol{x}}$ de $A\widehat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b}$ au sens des moindres carrés est la solution exacte des équations normales perturbées

$$A^T A\widehat{\boldsymbol{x}} = A^T(\boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}),$$

où $\boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ est une perturbation de $\boldsymbol{b}$. Démontrer que

$$\frac{\|\boldsymbol{x} - \widehat{\boldsymbol{x}}\|_2}{\|\boldsymbol{x}\|_2} \leq \kappa_2(A)\frac{\|\boldsymbol{b} - A\widehat{\boldsymbol{x}}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}, \tag{1}$$

où le nombre de conditionnement $\kappa_2(A)$ est donné par

$$\kappa_2(A) := \|A\|_2\|(A^T A)^{-1}A^T\|_2.$$

($A^+ := (A^T A)^{-1}A^T$ est appelé le pseudo-inverse de Moore-Penrose).

2. Pour la méthode A,

   (a) démontrer que A^TA est symétrique définie positive,

   (b) démontrer que les colonnes de la matrice $\widehat{Q} := AL^{-T}$ forment une base pour l'image de A, et que $\widehat{Q}^T\widehat{Q} = I_n$,

   (c) identifier la matrice triangulaire supérieure $\widehat{R}$ telle que $\widehat{Q}\widehat{R} = A$.

3. Soit A la matrice de Hilbert $\in \mathbb{R}^{m\times n}$, dont la (i,j)ième composante est

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, \quad i = 1,2,\ldots,m,\ j = 1,2,\ldots,n.$$

   Choisir $n = 2:12$ et $m = n+10$.

   (a) Pour toutes les méthodes A à E calculer $-\log_{10}\|I_n - \widehat{Q}^T\widehat{Q}\|_2$. Afficher les résultats sur un seul graphique avec, en abscisse, les valeurs de n (Noter, cependant, que vous serez obligés d'interrompre les calculs avec la méthode A bien avant $n = 12$).

   (b) Qu'est-ce qui est mesuré (approximativement) par $-\log_{10}\|I_n - \widehat{Q}^T\widehat{Q}\|_2$?

   (c) Commenter les résultats.

4. Soit $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ la même matrice que dans la question 3 (et, comme dans la question 3, $n = 2:12$, $m = n+10$) et soit le vecteur $\boldsymbol{b} = A\boldsymbol{x}$ où $\boldsymbol{x}$:= `ones(n,1)`. Utiliser la méthode E pour calculer la solution $\widehat{\boldsymbol{x}}$, au sens des moindres carrés, de

$$A\widehat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b},$$

   et, sur la même figure et avec, en abscisse, les valeurs de n, afficher les erreurs relatives et les résidus relatifs:

$$\frac{\|\boldsymbol{x} - \widehat{\boldsymbol{x}}\|_2}{\|\boldsymbol{x}\|_2} \quad \text{et} \quad \frac{\|\boldsymbol{b} - A\widehat{\boldsymbol{x}}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}.$$

   Utiliser (1) pour commenter les résultats. (Pour calculer $\kappa_2(A)$ vous pouvez utiliser la fonction MATLAB `norm`).

Algorithme 0: Gram-Schmidt classique.

pour $j = 1$ à n
  $\boldsymbol{v}_j = \boldsymbol{a}_j$
  pour $i = 1$ à $j-1$
    $r_{ij} = \boldsymbol{q}_i^T\boldsymbol{a}_j$
    $\boldsymbol{v}_j = \boldsymbol{v}_j - r_{ij}\boldsymbol{q}_i$
  fin
  $r_{jj} = \|\boldsymbol{v}_j\|_2$
  $\boldsymbol{q}_j = \boldsymbol{v}_j/r_{jj}$
fin