Devoir à la maison

Exercice 1. Soit A une matrice réelle symétrique définie positive $n \times n$ et $A = LU = C^*C$ ses décompositions LU et de Choleski. On note D_C la diagonale de C, c'est-à-dire la matrice

$$D = \begin{pmatrix} c_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_{2,2} & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & & c_{n,n} \end{pmatrix}$$

et on note de même D_U la diagonale de U.

1. Montrer que $U = D_C C$, et exprimer D_C en fonction de D_U.
2. Exprimer L en fonction de U et D_U.
3. On suppose que $U = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$. Que vaut A ?
4. On considère $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$. Est-ce que A admet une décomposition LU et une décomposition de Choleski ? La relation de la question 2 est-elle toujours valide ?

1. Il y avait une erreur dans l'énoncé, merci à ceux qui nous l'ont signalé très rapidement ! Il faut supposer que la matrice est définie positive et pas seulement positive. En effet, il existe des cas de matrice positives A (mais pas définies positives) telles qu'il n'y ai pas unicité des décompositions LU et de Cholesky. Mais si $A = L'U'$ est une autre décomposition de Cholesky, avec $U' \neq U$, on ne peut avoir à la fois $U = D_C C$ et $U' = D_C C$. On supposera donc A définie positive dans la suite.

Dans ce cas, la diagonale de C est à termes strictement positifs, donc D_C est inversible. On a donc $A = (C^* D_C^{-1})(D_C C)$. Mais pour tous indices i, j on a $[C^* D_C^{-1}]_{i,j} = c_{i,j}/c_{j,j}$, donc $C^* D_C^{-1}$ est une matrice triangulaire inférieure avec uniquement des 1 sur la diagonale ; comme $D_C C$ est triangulaire supérieure, la décomposition $A = (C^* D_C^{-1})(D_C C)$ satisfait les hypothèses de la définition de la décomposition LU, et par unicité de cette décomposition on a $C^* D_C^{-1} = L$ et $D_C C = U$.

Ainsi, on a $u_{i,i} = c_{i,i}^2$ pour tout i, donc $D_U = D_C^2$, et comme $u_{i,i}$ et $c_{i,i}$ sont positifs on a $c_{i,i} = \sqrt{u_{i,i}}$, ce qu'on peut noter $D_C = D_U^{1/2}$.

Remarque : La notation $D_U^{1/2}$ utilisée ici correspond bien à une convention en mathématiques : pour toute fonction $f : \mathcal{D} \to \mathbb{C}$ où $\mathcal{D} \subset \mathbb{C}$, et toute matrice diagonalisable $A = P^{-1} D P$ de spectre inclus dans $\mathcal{D}$ (avec D diagonale) on note $f(A) = P^{-1} D' P$ où D' est la matrice diagonale telle que $D_{i,i} = f(D_{i,i})$.

2. On peut d'abord exprimer C en fonction de U : on a $D_C^{-1} U = C$ donc
$$C = D_U^{-\frac{1}{2}} U \ .$$
Mais on a montré dans la réponse à la première question que $L = C^* D_C^{-1/2}$, donc
$$L = \left(D_U^{-\frac{1}{2}} U \right)^* D_U^{-\frac{1}{2}} = U^* D_U^{-1} \ .$$

3. D'après la réponse précédente, on a
$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \ .$$
Ainsi,
$$A = LU = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 7 \end{pmatrix} \ .$$

4. On peut vérifier que $A = LU$ avec

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$$

donc A admet une décomposition LU. On déduit de cette décomposition que $\text{dét}(A) = -2$, donc A possède des valeurs propres négatives, et donc n'admet pas de décomposition de Cholesky. Cependant, on a toujours

$$L = U^* D_U^{-1}$$

cette relation est donc toujours valide, même si sa preuve par la décomposition C^*C n'est pas possible.

Remarque : La relation $L = U^* D_U^{-1}$ est en fait valide pour toute matrice A inversible satisfaisant $A^* = A$. Une manière de le montrer est de prolonger la relation par analycité. En effet, les fonction $A \mapsto U$ et $A \mapsto L$ sont analytiques sur l'ensemble ouvert $E \subset M_{n,n}(\mathbb{C})$ des matrices inversibles admettant une décomposition LU (on peut montrer l'analycité en utilisant les formules explicites pour les $L_{i,j}$, ce sont même des fonctions rationnelles). Notons $G = \{A \in E, A^* = A\}$, il s'agit aussi d'un sous ensemble ouvert de l'ensemble des matrices symétriques. Ainsi, la fonction $\phi : A \in G \mapsto L - U^* D_U^{-1}$ est une fonction analytique sur G. De plus, l'ensemble des matrices définies positives est un ouvert de G, et comme $L = U^* D_U^{-1}$ si A est définie positive, la fonction ϕ s'annule sur cet ensemble. Toute fonction analytique s'annulant sur un ouvert est nulle, donc $\phi(A) = 0$ pour toute matrice $A \in G$ et donc $L = U^* D_U^{-1}$ pour toute matrice symétrique inversible admettant une décomposition LU.

Exercice 2. Soient $a, b \in \mathbb{R}$ et posons $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$.

1. Calculer les décompositions LU et de Choleski de A dans les cas où elles existent.

2. Trouver la décomposition de Choleski de A^*A, en notant C la matrice triangulaire supérieure telle que $A^*A = C^*C$. On considère $A = QR$ une décomposition QR de A, et on suppose que les termes diagonaux de R sont positifs. Calculer R.

Soient $a, b \in \mathbb{R}$ et posons $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$.

1. Une décomposition LU existe si et seulement si $a \neq 0$ ou $a = b = 0$. En effet, si $a \neq 0$ on a
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{b}{a} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & \frac{a^2-b^2}{a} \end{pmatrix}$$
et si $a = b = 0$, on a $A = 0$ et donc pour toute matrice L on a $A = L.0$, donc A admet une décomposition LU. Réciproquement si A admet une décomposition LU, on a $U_{1,1} = a$ donc si $a = 0$ on a $\text{dét}(A) = 0$ mais $\text{dét}(A) = -b^2$ donc $b = 0$.
Au sens strict du terme, une décomposition de Cholesky existe si et seulement si A est définie positive, ce qui arrive si et seulement si $a > |b|$. En effet, le polynôme charactéristique de A est
$$P_A(X) = X^2 - 2aX + (a^2 - b^2) = (X - (a + b))(X - (a - b))$$
donc les deux valeurs propres sont positives si et seulement si $a > b$ et $a > -b$.
Dans ce cas, on peut appliquer l'exercice 1 et déduire C de U :
$$C = D_U^{-1/2} U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{a}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{a}{a^2-b^2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & \frac{a^2-b^2}{a} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{a} & \frac{b}{\sqrt{a}} \\ 0 & \sqrt{\frac{a^2-b^2}{a}} \end{pmatrix}$$
(notons que a et $a^2 - b^2$ sont strictement positifs, donc admettent une racine et sont inversibles).

2. On commence par calculer A^*A : on a
$$A^*A = \begin{pmatrix} a^2 + b^2 & 2ab \\ 2ab & a^2 + b^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a' & b' \\ b' & a' \end{pmatrix}$$

où $a' = a^2+b^2$ et $b' = 2ab$. Ainsi, d'après la réponse à la question 1 la matrice A^*A admet une décomposition de Cholesky si et seulement si $a^2 + b^2 > 2|ab|$, ce qui arrive si et seulement si $a \neq 0$ ou $b \neq 0$. Il faut donc exclure le cas $a = b = 0$ pour avoir une décomposition de Cholesky au sens strict du terme, nous reviendrons au cas $a = b = 0$ par la suite. Dans ce cas, on a

$$C = \begin{pmatrix} \sqrt{a'} & \frac{b'}{\sqrt{a'}} \\ 0 & \sqrt{\frac{(a')^2-(b')^2}{a'}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{a^2+b^2} & \frac{2ab}{\sqrt{a^2+b^2}} \\ 0 & \frac{\left|a^2-b^2\right|}{\sqrt{a^2+b^2}} \end{pmatrix} .$$

D'autre part, si $A = QR$ avec Q orthogonale et R triangulaire supérieure à coefficients positifs, on a

$$A^*A = R^*Q^*QR = R^*R$$

car $Q^*Q = I$ par définition de l'orthogonalité des matrices. Ainsi, par unicité de la décomposition de Cholesky, on a $R = C$. On peut aussi calculer $Q = AR^{-1}$ et vérifier qu'il s'agit d'une matrice orthogonale, mais ce n'est pas demandé.

Il reste juste à traiter le cas où $a = b = 0$. Dans ce cas, $A = 0$, et il existe une unique matrice C telle que $A^*A = C^*C$, à savoir $C = 0$. En effet, pour toute matrice C si $C^*C = 0$ alors pour tout vecteur v on a $\|Cv\|^2 = v^T C^*Cv = 0$ donc $Cv = 0$. On a donc aussi $R = C = 0$. Par contre, il n'y a plus unicité de Q, toute matrice orthogonale convient.

Exercice 3. Soit $h > 0$. Déterminer $k \in \mathbb{R}$ de sorte que le schéma à trois points

$$\alpha_0 y(x) + \alpha_1 y(x+h) + \alpha_2 y(x+k)$$

soit une approximation de $y''(x)$ la meilleure possible.

Deux développements de Taylor à l'ordre de 3 de $y(x+h)$ et $y(x+k)$ conduisent pour avoir la meilleure approximation possible de $y''(x)$ par $\alpha_0 y(x) + \alpha_1 y(x+h) + \alpha_2 y(x+k)$ aux conditions suivantes :

$$\begin{cases} \alpha_1 h^2 + \alpha_2 k^2 = 1 & \text{car on veut un coeff 1 devant } y''(x) \quad (0) \\ \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 = 0 & \text{car on veut un coeff 0 devant } y(x) \quad (1) \\ \alpha_1 h + \alpha_2 h = 0 & \text{car on veut un coeff 0 devant } y'(x) \quad (2) \\ \alpha_1 h^3 + \alpha_2 k^3 = 0 & \text{car on veut un coeff 0 devant } y'''(x) \quad (3) \end{cases}$$

Pour que le système (2) et (3) ait des solutions, il faut que son déterminant soit nul. Ceci est est équivalent à $k = 0$ (et alors $\alpha_1 = 0$) ce qui n'est pas optimal (à vérifier) ou bien $h^2 = k^2$.

Cas 1 : $h = k$. (2) et (3) imposent $\alpha_1 = -\alpha_2$ ce qui contredit (0) donc pas de solution dans ce cas.

Cas 2 : $h = -k$. (2) et (3) sont bien vérifiées si $\alpha_1 = \alpha_2$. (0) donne alors $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{h^2}$ et (1) implique $\alpha_0 = -\frac{2}{h^2}$.

On retrouve ainsi que l'approximation "classique" d'ordre 2 de la dérivée seconde est optimale dans ce cadre

$$y''(x) = \frac{y(x+h) + y(x-h) - 2y(x)}{h^2} + O(h^2)$$

Exercice 4. On considère l'équation

$$\begin{cases} -u'' + cu = 0 & \text{sur }]0,1[\\ u'(0) = \lambda(u(0) - v), & u(1) = 0 \end{cases}$$

où λ et v sont deux réels positifs ou nuls dont on suposera qu'elle admet une unique solution infiniment dérivable. On considère une subdivision $(x_i)_{0 \leq i \leq N+1}$ de $[0,1]$ à pas constant $h = \frac{1}{N+1}$. On notera u_i les valeurs approchant $u(x_i)$ et $U = (u_i)_{0 \leq i \leq N+1}$ le vecteur associé.

On dit qu'un ensemble de conditions (linéaires) discrétes $AU = b$ pour une matrice A donnée de taille $(N+2)(N+2)$ est consistant d'ordre l pour l'équation si $||AU_s - b||_\infty = O(h^l)$ où $U_s = (u(x_i))_{0 \leq i \leq N+1}$.

1. Quelles sont les inconnues du vecteur discret ? Ecrire le schéma différences finies obtenu en approchant la condition sur $u'(0)$ par un schéma décentré. Écrire le système linéaire associé. Prouver sa consistance et donner son ordre.
2. Pour faire mieux, on introduit un point fictif $x_{-1} = -h$ et l'inconnue correspondante u_{-1}, et on discrétise la condition sur $u'(0)$ par un schéma centré. Pour éliminer u_{-1} on discrétise l'équation en $x = 0$. Écrire le système linéaire associé. Après élimination de u_{-1}, prouver la consistance et déterminer l'ordre de ce schéma.

1. Les inconnues sont ici les valeurs $(u_i)_{0\le i\le N}$: on sait que $u(1) = u_{N+1} = 0$ mais la valeur de u_0 n'est pas donnée explicitement. On utilise une discrétisation décentrée de la dérivée première :

$$u'(0) = \frac{u(h) - u(0)}{h} + O(h)$$

Ainsi on impose

$$\frac{u_1 - u_0}{h} = \lambda(u_0 - v)$$

d'où la relation linéaire

$$\frac{1}{h}((1+\lambda h)u_0 - u_1) = \lambda v$$

et le système associé de dimension $(N+1)(N+1)$ en utilisant l'approximation classique de la dérivée seconde d'ordre 2 en les points interieurs

$$A = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} h(1+\lambda h) & -h & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2+h^2c & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2+h^2c & -1 & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & -1 & 2+h^2c & -1 \\ 0 & & & & -1 & 2+h^2c \end{pmatrix}$$

d'inconnu $U = (u_i)_{0\leq i\leq N}$ et de second membre $b = (\lambda v, 0, \ldots, 0)$. L'approximation de la dérivée première de la première ligne génère une erreur en $O(h)$, et l'approximation de u'' génère une erreur d'ordre $O(h^2)$, donc le schémas est d'ordre 1. Pour le démontrer en détails : il s'agit de montrer que $||AU_s - b||_\infty \leq Ch$ pour une constante K. Notons w_k la k-ième coordonnée de $AU_s - b$, par définition de U_s on a

$$w_1 = \frac{u(0) - u(h)}{h} + \lambda(u(0) - v) = u'(0) + \lambda(u(0) - v) + r_1(h)$$

où $r_1 = \frac{u(0)-u(h)}{h} - u'(h)$, et pour tout $k \geq 1$,

$$w_{k+1} = \frac{2u(x_k) - u(x_k + h) - u(x_k - h)}{h^2} + cu(kh) = -u''(x_k) + cu(x_k) + r_k(h)$$

où $r_k(h) = \frac{2u(x_k)-u(x_k+h)-u(x_k-h)}{h^2} + u''(x_k)$ (toujours valide pour $k = N$ car $u(1) = 0$). Mais comme u est solution de l'équation différentielle, les termes autres que les $r_k(h)$ s'annulent. On a donc

$$||AU_s - b||_\infty \leq \max_{1\leq k\leq N} |r_k(h)| \ .$$

Or u est infiniment dérivable (par hypothèse de l'énoncé) et $[0, 1]$ est compact, donc $||f''||_\infty$ et $||f^{(4)}||_\infty$ sont finies, et par l'inégalité de Taylor-Lagrange (ordre 1 et ordre 3) on a

$$|r_1(h)| \leq \frac{h}{2}||f''||_\infty \qquad\qquad |r_{k+1}(h)| \leq \frac{h^2}{12}||f^{(4)}||_\infty$$

donc, en prenant $C = \max\left(\frac{1}{2}||f''||_\infty,\ \frac{1}{12}||f^{(4)}||_\infty\right)$ on a bien $||AU_s - b||_\infty \leq Ch$ (pour $h \leq 1$).

b) La condition sur la dérivée en 0 se discrétise de manière centrée en

$$\frac{u_1 - u_{-1}}{2h} = \lambda(u_0 - v)$$

alors que l'équation différentielle en 0 donne

$$-u_{-1} + 2u_0 - u_1 + h^2 cu_0 = 0$$

d'où $u_{-1} = (2+h^2c)u_0 - u_1$ que l'on peut substituer dans la discrétisation de la dérivée pour obtenir la relation linéaire

$$\frac{1}{2h}((2 + h^2c + 2h\lambda)u_0 - 2u_1) = \lambda v.$$

Le nouveau système linéaire est donc

$$A = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} \frac{h}{2}(2+h^2c+2h\lambda) & -h & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2+h^2c & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 2+h^2c & -1 & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & -1 & 2+h^2c & -1 \\ 0 & & & & -1 & 2+h^2c \end{pmatrix}$$

pour un même second membre. Là encore, on vérifie aisément que l'on a maintenant une consistance d'ordre 2 pusiqu'on a utilisé

$$u'(0) = \frac{u(-h) - u(h)}{2h} + O(h^2)$$

et

$$u''(0) = \frac{u(-h) + u(h) - 2u(0)}{h^2} + O(h^2).$$

Bonus non demandé : vous trouverez sur la figure ci-dessous une illustration de l'effet de la différence d'ordre des deux méthodes pour $u(x) = \cos(\frac{9}{\pi}x)$, $N = 100$, $\lambda = 2$, $c = -(\frac{9}{\pi})^2$ et $v = 1$.