Méthode de Gauss et factorisation LU

I – Rappels sur la méthode de Gauss

Soit $A \in M_N(\mathbb{R})$ inversible et $b \in \mathbb{R}^N$

Système linéaire à résoudre : Ax = b

Méthode de Gauss (élimination) :

combinaisons linéaires des lignes du système

- \Rightarrow suite de systèmes équivalents $A^{(k)}x = b^{(k)}$ où l'on fait apparaître (k-1) colonnes de 0 de tailles décroissantes
- \Rightarrow système final $A^{(N)}x = b^{(N)}$ triangulaire

"méthode directe" : solution x après nb fini d'opérations

Soit $A \in M_N(\mathbb{R})$ inversible et $b \in \mathbb{R}^N$. Système linéaire à résoudre : Ax = b

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \dots + a_{1N}x_N = b_1 \\ \vdots \\ a_{N1}x_1 + \dots + a_{NN}x_N = b_N \end{cases}$$
 Si $a_{11} \neq 0$, on peut éliminer x_1 dans les lignes 2 à N.

On dit alors qu'on choisit a_{11} comme "pivot".

Soit $l_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}}$

Combinaisons linéaires : pour i=2...N : (ligne i) \rightarrow (ligne i) - $l_{i1} \times$ (ligne 1)

Système linéaire équivalent (de taille N) à résoudre : $A^{(2)}x = b^{(2)}$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1N}x_N = b_1 \\ 0 + a_{22}^{(2)}x_2 + \dots + a_{2N}^{(2)}x_N = b_2^{(2)} \\ \vdots \\ 0 + a_{N2}^{(2)}x_2 + \dots + a_{NN}^{(2)}x_N = b_N^{(2)} \end{cases} \qquad a_{ij}^{(2)} = a_{ij} - l_{i1}a_{1j} \\ \vdots \\ b_i^{(2)} = b_i - l_{i1}b_1$$

$$a_{11}x_1 + ... + a_{1N}x_N = b_1$$
 Si $a_{11} = 0$, on permute la ligne 1 avec une autre où $a_{i1} \neq 0$ (possible puisque A inversible). \Rightarrow on se ramène au cas précédent $a_{N1}x_1 + ... + a_{NN}x_N = b_N$

 \Rightarrow Système linéaire équivalent (de taille N) à résoudre : $A^{(2)}x = b^{(2)}$

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1N}x_N = b_1$$

$$0 + a_{22}^{(2)}x_2 + \dots + a_{2N}^{(2)}x_N = b_2^{(2)}$$

$$\vdots$$

$$0 + a_{N2}^{(2)}x_2 + \dots + a_{NN}^{(2)}x_N = b_N^{(2)}$$
Sous-système de dimension $N-1$

$$\vdots$$

$$pour (x_2, \dots, x_N)$$

On répète la même procédure sur le sous-système de dimension N-1 pour $(x_2,...,x_N)$

 \Rightarrow on élimine x_2 , des lignes 3 à N

Système linéaire équivalent (de taille N) à résoudre : $A^{(3)} x = b^{(3)}$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1N}x_N = b_1 \\ 0 + a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \dots + a_{2N}^{(2)}x_N = b_2^{(2)} \\ 0 + 0 + a_{33}^{(3)}x_3 + \dots + a_{3N}^{(3)}x_N = b_3^{(3)} \\ \vdots \\ 0 + 0 + a_{N3}^{(3)}x_3 + \dots + a_{NN}^{(3)}x_N = b_N^{(3)} \end{cases}$$
 Sous-système de dimension $N-2$ pour (x_3, \dots, x_N)

On répète la même procédure sur le sous-système de dimension N-2 pour $(x_3,...,x_N)$

 \Rightarrow on élimine x_3 des lignes 4 à N

Etc...

 \Rightarrow Suite de systèmes équivalents $A^{(k)}x = b^{(k)}, k = 2,...,N$

Le dernier système $A^{(N)}x = b^{(N)}$ est triangulaire :

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1N}x_N = b_1 \\ 0 + a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \dots + a_{2N}^{(2)}x_N = b_2^{(2)} \\ 0 + 0 + a_{33}^{(3)}x_3 + \dots + a_{3N}^{(3)}x_N = b_3^{(3)} \\ \vdots \\ 0 + 0 + 0 + \dots + 0 + a_{NN}^{(N)}x_N = b_N^{(N)} \end{cases}$$

Notons $A^{(N)} = U$ (matrice triangulaire supérieure) et $b^{(N)} = y$

de l'élimination de Gauss : l

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + u_{13}x_3 + ... + u_{1N}x_N = y_1 \\ 0 + u_{22}x_2 + u_{23}x_3 + ... + u_{2N}x_N = y_2 \\ 0 + 0 + u_{33}x_3 + ... + u_{3N}x_N = y_3 \\ \vdots \\ 0 + 0 + 0 + ... + 0 + u_{NN}x_N = y_N \end{cases}$$

Résolution du système triangulaire :

$$x_N = \frac{y_N}{u_{NN}}$$
 et pour $i = N - 1, N - 2, ..., 1$:

$$x_i = \frac{1}{u_{ij}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{N} u_{ij} x_j \right) \Rightarrow \text{ on a résolu le système initial } Ax = b$$

Exemple:

$$(\mathbf{A^{(1)}x} = \mathbf{b^{(1)}}) \quad \begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{3}x_2 + \frac{1}{4}x_3 = \frac{13}{12} \\ \frac{1}{3}x_1 + \frac{1}{4}x_2 + \frac{1}{5}x_3 = \frac{47}{60} \end{cases}$$

- On multiplie la 1ère ligne par 1/2 et on la soustrait à la 2ème ligne.
- On multiplie la 1ère ligne par 1/3 et on la soustrait à la 2ème ligne. On obtient le système équivalent :

$$(\mathbf{A^{(2)}x} = \mathbf{b^{(2)}}) \begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ 0 + \frac{1}{12}x_2 + \frac{1}{12}x_3 = \frac{1}{6} \\ 0 + \frac{1}{12}x_2 + \frac{4}{45}x_3 = \frac{31}{180} \end{cases}$$

$$(\mathbf{A^{(2)}x} = \mathbf{b^{(2)}}) \quad \begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ 0 + \frac{1}{12}x_2 + \frac{1}{12}x_3 = \frac{1}{6} \\ 0 + \frac{1}{12}x_2 + \frac{4}{45}x_3 = \frac{31}{180} \end{cases}$$

- On soustrait la 2ième ligne à la 3ième.

On obtient:

$$(\mathbf{A^{(3)}x} = \mathbf{b^{(3)}}) \quad \begin{cases} x_1 + \frac{1}{2}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = \frac{11}{6} \\ 0 + \frac{1}{12}x_2 + \frac{1}{12}x_3 = \frac{1}{6} \\ 0 + 0 + \frac{1}{180}x_3 = \frac{1}{180} \end{cases}$$

C'est un système **triangulaire**. On le résout en partant de la dernière ligne : $x_3 = 1$, puis $x_2 = 12(1/6 - 1/12) = 1$, puis $x_1 = 11/6 - 1/2 - 1/3 = 1$.

Coût de la méthode de Gauss

Soit $A \in M_N(\mathbb{R})$ inversible et $b \in \mathbb{R}^N$. Système linéaire à résoudre : Ax = b

On calcule un équivalent quand $N \rightarrow \infty$ du nombre d'opérations arithmétiques élémentaires $(+,-,\times,/)$ nécessaires pour l'élimination de Gauss.

On suppose pour simplifier que celle-ci se fait sans permutations.

On suppose que la matrice A est pleine.

Etape 1
$$\Rightarrow$$
 système linéaire équivalent : $A^{(2)} x = b^{(2)}$

Combinaisons linéaires : pour i=2...N : (ligne i) \rightarrow (ligne i) - $l_{i1} \times$ (ligne 1)

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1N}x_N = b_1 \\ 0 + a_{22}^{(2)}x_2 + \dots + a_{2N}^{(2)}x_N = b_2^{(2)} \\ \vdots \\ 0 + a_{N2}^{(2)}x_2 + \dots + a_{NN}^{(2)}x_N = b_N^{(2)} \end{cases}$$

$$b_i^{(2)} = a_{ij} - l_{i1}a_{1j}$$

$$b_i^{(2)} = b_i - l_{i1}b_1$$

Calculer
$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}}$$
, $i = 2...N$: N-1 divisions

Calculer
$$a_{ij} - l_{i1}a_{1j}$$
, $2 \le i, j \le N$: $(N-1)^2$ multiplications et soustractions

Calculer
$$b_i - l_{i1}b_1$$
, $2 \le i \le N$: N-1 multiplications et soustractions

$$\Rightarrow$$
 passage $Ax = b$ à $A^{(2)}x = b^{(2)}$ en : $2N^2 - N - 1$ opérations

Etapes suivantes:

même procédure pour sous-systèmes de taille
$$N-1$$
, $N-2$,...,2

Nombre d'opérations pour obtenir système triangulaire final Ux = y:

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

Rappel de quelques équivalents :

vaients.

$$\sum_{k=1}^{N} k = \frac{N(N+1)}{2} \approx (1/2)N^2 \text{ quand } N \to \infty$$

Par ailleurs on remarque que :

$$\frac{1}{3} \sum_{k=0}^{N} ((k+1)^3 - k^3) = \frac{(N+1)^3}{3} = \sum_{k=0}^{N} (k^2 + k + 1/3)$$

On en déduit :

$$\sum_{k=0}^{N} k^2 \approx (1/3) N^3 \text{ quand } N \to \infty$$

Par récurrence :
$$\sum_{k=1}^{N} k^p \approx \frac{1}{p+1} N^{p+1}$$
 quand $N \to \infty$

Application:

nombre d'opérations pour obtenir système triangulaire final Ux = y:

$$\sum_{k=2}^{N} (2k^2 - k - 1) \approx \sum_{k=2}^{N} 2k^2 \approx (2/3)N^3 \text{ opérations}$$

 $((1/3)N^3)$ soustractions et multiplications)

Résolution dernier système Ux = y (triangulaire):

$$x_N = \frac{y_N}{u_{NN}}$$
 et pour $i = N - 1, N - 2, ..., 1$:

$$x_{i} = \frac{1}{u_{ii}} \left(y_{i} - \sum_{j=i+1}^{N} u_{ij} x_{j} \right)$$

 \Rightarrow N divisions,

$$1+2+...+(N-1) = N(N-1)/2$$
 multiplications,

$$1+2+...+(N-1) = N(N-1)/2$$
 soustractions

$$\Rightarrow O(N^2)$$
 opérations

⇒ Coût total élevé de la résolution du système :

$$\approx (2/3)N^3$$
 opérations (pour matrice A pleine)

II – Utilité d'une factorisation matricielle

Nous verrons que la méthode de Gauss fournit aussi une factorisation : A = LU ou PA = LU

L: matrice triangulaire inférieure (diagonale unité)

U: matrice triangulaire supérieure

P: matrice de permutation

(permutation des colonnes de la matrice identité)

Pour résoudre $A x = b \Leftrightarrow P A x = P b$:

- 1) factoriser PA = LU
- $P A x = P b \Leftrightarrow L(U x) = P b$, on pose U x = y
- 2) "descente" : calculer la solution y de L y = P b
- 3) "remontée" : calculer la solution x de U x = y

Coût de l'algorithme (nombre d'opérations arithmétiques élémentaires) pour une matrice *A* pleine :

- 1) factorisation PA = LU: $\sim (2/3) N^3$
- 2) système triangulaire $L y = P b : O(N^2)$
- 3) système triangulaire U x = $y : O(N^2)$

 \Rightarrow Factorisation utile lorsqu'il faut résoudre de nombreuses fois des systèmes linéaires dont le second membre change mais pas la matrice A (factorisée une seule fois)

Exemples d'applications où cela se produit : intégration en temps d'équations différentielles ou aux dérivées partielles, résolution de systèmes d'équations non linéaires

Exemple: discrétisation d'une équation différentielle

$$\frac{dx}{dt} = M \ x + f(t), \quad x(t) \in \mathbb{R}^{N}$$

$$M \in M_N(\mathbb{R}), f(.): \mathbb{R} \to \mathbb{R}^N$$

Approximation numérique des solutions : $x_k \approx x(k \Delta t)$ Schéma "implicite" :

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\Delta t} = M x_{k+1} + f((k+1)\Delta t)$$

$$\Leftrightarrow A x_{k+1} = b_k \Leftrightarrow L U x_{k+1} = P b_k$$

avec
$$A = I - \Delta t M$$
, $b_k = x_k + \Delta t f((k+1)\Delta t)$

matrices A et P, L, U inchangées à chaque itération, second membre b_k variable

Calcul pratique des itérés x_k définis par $A x_{k+1} = b_k$:

- 1) factorisation PA = LU (coût $O(n^3)$)
- 2) pour tout $k \ge 0$:

 x_k étant connu, on calcule $b_k = x_k + \Delta t \ f((k+1)\Delta t)$

- résoudre le système triangulaire (coût $O(n^2)$) : $Ly_k = Pb_k$
- résoudre le système triangulaire (coût $O(n^2)$) : $U x_{k+1} = y_k$

III - Factorisation A=LU ou PA=LU

 réinterprétation matricielle des manipulations de la méthode de Gauss

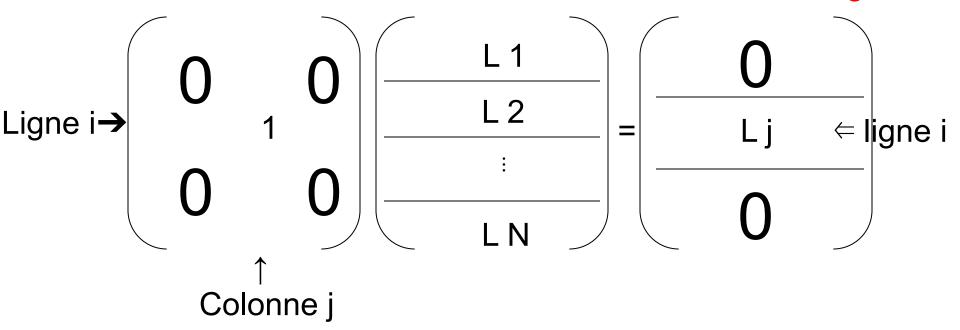
1er cas:

la méthode de Gauss peut s'effectuer sans permutation des lignes du système

(pivots $a_{k,k}^{(k)}$ non nuls)

⇒reformulation matricielle des combinaisons linéaires de lignes

Reformulation matricielle des combinaisons linéaires de lignes



Pour soustraire $\ell \times Lj$ à Li:

Ligne i
$$\rightarrow$$
 $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix} L1 \\ L2 \\ \vdots \\ Li \end{pmatrix}$ = $\begin{pmatrix} L1 \\ L2 \\ \vdots \\ Li - \ell \times Lj \end{pmatrix}$ \Leftarrow ligne i \uparrow Colonne j

Elimination de Gauss sur $A \in M_N(IR)$ inversible :

$$A = A^{(1)} \rightarrow A^{(2)} \rightarrow \cdots \rightarrow A^{(N)}$$
 triangulaire supérieure

$$\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N}
\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -l_{2,1} & 1 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 1 & 0 \\ -l_{N,1} & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}$$

$$-l_{N,1}$$
 0 ··· 0 1) \ a_{N1} a_{N2} ··· a_{NN}

$$= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1} \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{A}_{1} \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

i.e.
$$T_1 A = A^{(2)}$$

kième étape de l'élimination de Gauss sur une matrice A :

$$T_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \vdots & -l_{k+1,k} & \ddots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & -l_{N,k} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(k)} & a_{1,2}^{(k)} & \cdots & \cdots & a_{1,N}^{(k)} \\ 0 & a_{2,2}^{(k)} & \cdots & \cdots & a_{2,N}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & 0 & a_{k,k}^{(k)} & \cdots & a_{k,N}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{N,k}^{(k)} & \cdots & a_{N,N}^{(k)} \end{pmatrix} = A^{(k)}$$

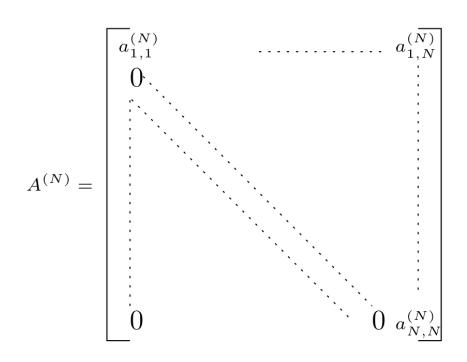
$$l_{i,k} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \qquad T_k A^{(k)} = A^{(k+1)}$$

 T_k : matrice d'élimination

A la fin de l'élimination de Gauss sur A :

$$A^{(N)} = T_{N-1} T_{N-2} \cdots T_2 T_1 A = T A$$

T triangulaire inférieure, coefs diagonaux = 1



= *U* triangulaire supérieure



Factorisation de A:

$$A = T^{-1}U$$
, T^{-1} triangulaire inférieure

Calcul de l'inverse de T:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & 0 \\ & & 1 \\ \ell_{ij} & & 1 \end{pmatrix}$$

Montrons que $L = T^{-1}$

 $T L = T_{N-1} T_{N-2} \cdots T_2 T_1 L = I$

Bilan:

Si l'élimination de Gauss faite sur A peut s'effectuer sans permutation des lignes de A (pivots $a_{k,k}^{(k)}$ non nuls) alors on obtient une factorisation LU de A :

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \ell & ij & 1 \end{pmatrix} \qquad \mathsf{U}^{\mathsf{J}} = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(N)} & \cdots & a_{1,N}^{(N)} \\ 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 \\ a_{N,N}^{(N)} \end{pmatrix}$$

 \rightarrow Sous quelle condition a - t - on tous les pivots $a_{k,k}^{(k)}$ non nuls ?

$$\Delta_1, \Delta_2, ..., \Delta_N$$

sous - matrices principales de A

$$\Delta_k = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k,1} & \cdots & a_{k,k} \end{pmatrix}$$
uls

1) si tous les pivots $a_{k,k}^{(k)}$ sont non nuls

$$\det(\Delta_k) = \det \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,k} \\ 0 & a_{2,2}^{(2)} & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,k} \\ a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} \\ 0 & & \vdots & & \\ 0 & & & a_{kk}^{(k)} \end{pmatrix}$$

Donc: $\det(\Delta_k) = a_{1,1} a_{2,2}^{(2)} ... a_{k,k}^{(k)} \neq 0$

2) Réciproquement, si $det(\Delta_k) \neq 0$ pour tout k:

 $det(\Delta_1) = a_{1,1} \neq 0 \rightarrow 1$ ère étape de Gauss sans permutation

Alors:
$$\det(\Delta_2) = a_{1,1} a_{2,2}^{(2)} \neq 0 \rightarrow a_{2,2}^{(2)} \neq 0$$

→ 2ème étape de Gauss sans permutation

Alors:
$$\det(\Delta_3) = a_{11} a_{2,2}^{(2)} a_{3,3}^{(3)} \neq 0 \rightarrow a_{3,3}^{(3)} \neq 0$$

→ 3ème étape de Gauss sans permutation

Etc....

→ toutes les étapes de Gauss s'effectuent sans permutation

Conclusion:

Théorème

L'élimination de Gauss faite sur $A \in M_N(IR)$ inversible peut s'effectuer sans permutation des lignes de A (tous pivots $a_{k,k}^{(k)} \neq 0$) si et seulement si les N sous-matrices Δ_k sont inversibles.

$$\Delta_k = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k,1} & \cdots & a_{k,k} \end{pmatrix}$$

On a alors : A = L U

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \ell_{ij} & 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$
 $l_{i,j} = \frac{a_{ij}^{(j)}}{a_{jj}^{(j)}}$ $U = A^{(N)} = \begin{bmatrix} a_{i,N}^{(N)} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

Exemple de factorisation A = LU:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 \end{pmatrix} \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ ? & 1 & 0 \\ ? & ? & 1 \end{pmatrix}$$

ligne 2 \leftarrow ligne 2 $-l_{21} \times$ ligne 1, $l_{21} = 1/2$,

ligne 3 \leftarrow ligne 3 $-l_{31} \times$ ligne 1, $l_{31} = 1/3$:

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 0 & 1/12 & 1/12 \\ 0 & 1/12 & 4/45 \end{pmatrix} \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/3 & ? & 1 \end{pmatrix}$$

ligne 3 \leftarrow ligne 3 $-l_{32} \times$ ligne 2, $l_{32} = 1$:

$$U = A^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 0 & 1/12 & 1/12 \\ 0 & 0 & 1/180 \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/3 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

2ème cas:

la méthode de Gauss est effectuée avec des permutations des lignes du système

Raisons possibles:

- ❖Un pivot s' annule
- Précision des calculs sur machine
- Préserver une structure de matrice creuse
- ⇒reformulation matricielle de la méthode de Gauss combinant combinaisons linéaires de lignes et permutations

Théorème

Soit $A \in M_N(IR)$ inversible. Il existe une matrice de permutation P, une matrice triangulaire inférieure L (diagonale unité), et une matrice triangulaire supérieure U inversible telles que :

$$PA = LU$$

Cette factorisation se calcule explicitement par élimination de Gauss sur A. Les matrices L et U sont uniques lorsque P est fixée.

1) Unicité :
$$PA=L_1U_1=L_2U_2$$

$$\rightarrow L_2^{-1}L_1=U_2U_1^{-1}$$

matrice triangulaire INF diagonale unité = matrice triangulaire SUP

$$\rightarrow L_2^{-1}L_1=U_2U_1^{-1}=I$$

$$\rightarrow L_1 = L_2, \ U_1 = U_2$$

Existence d'une factorisation PA=LU : reformulation matricielle des combinaisons linéaires de lignes + permutations

Matrice de transposition :

On permute colonnes i et j de la matrice identité

$$P_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{0} & 0 & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \leftarrow \text{ligne } i$$

$$\uparrow \qquad \uparrow \qquad \uparrow$$

$$\text{col. } i \qquad \text{col. } i$$

 P_{ii} x permute les composantes i et j d'un vecteur colonne x

 P_{ij} A permute les lignes i et j d'une matrice A

 $A P_{ij}$ permute les colonnes i et j d'une matrice A

Nous allons montrer que PA = LU

 $P = P_{N-1,i_{N-1}}...P_{3i_3}P_{2i_2}P_{1i_1}$ matrice de permutation

L triangulaire inférieure, U triangulaire supérieure

Produits matrices de transposition et élimination :

$$P_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{0} & 0 & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \leftarrow \text{ligne } j$$

$$\uparrow \qquad \uparrow$$

$$\text{col. } i \qquad \text{col. } j$$

Produit d'une matrice de permutation P_{ji} par une matrice d'élimination T_k (k < j < i):

$$P_{j,i} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \vdots & -l_{j,k} & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -l_{i,k} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -l_{N,k} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \vdots & -l_{i,k} & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -l_{j,k} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -l_{N,k} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} P_{j,i}$$

$$U = T_{N-1} P_{N-1,i_{N-1}} T_{N-2} \cdots P_{3i_3} T_2 P_{2i_2} T_1 P_{1i_1} A = \tilde{T} P A$$

 $P = P_{N-1,i_{N-1}}...P_{3i_3}P_{2i_2}P_{1i_1}$ matrice de permutation (permutation des colonnes de la matrice identité)

 \tilde{T} a la même structure que T (triangulaire inférieure, diagonale unité) U triangulaire supérieure inversible

PA=LU, $L=\tilde{T}^{-1}$ triangulaire inférieure, diagonale unité

Calcul pratique de L : on fait suivre les permutations des lignes de A aux lignes de L (coefficients ℓ_{ij}) calculées aux étapes précédentes de l'élimination de Gauss

Exemple: PA = LU

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

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \qquad P = P_{34}P_{13} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Détail:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \qquad P_{13}A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$T_1 P_{13} A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & -2 \end{pmatrix} \qquad T_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad L2 \leftarrow L2 - \frac{1}{2} L1$$

$$T_2 T_1 P_{13} A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -3 \end{pmatrix} \qquad T_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{L3} \leftarrow \text{L3-L2}$$

$$\text{L4} \leftarrow \text{L4+L2}$$

$$P_{34}T_2T_1P_{13}A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = U$$

 $P_{34}T_2T_1P_{13}A = U$ avec

$$P_{34} T_2 = P_{34} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} P_{34} = \tilde{T}_2 P_{34}$$

$$P_{34} T_1 = P_{34} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} P_{34} = \tilde{T}_1 P_{34}$$

d'où : $\tilde{T}_{2}\tilde{T}_{1}P_{34}P_{13}A = U$

donc
$$PA = LU$$
 avec $P = P_{34}P_{13}$, $P\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_3 \\ x_2 \\ x_4 \\ x_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$

$$L = (\tilde{T}_2 \tilde{T}_1)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Amplification des erreurs d'arrondi pour de petits pivots:

Exemple:
$$\int \cot 0 < \varepsilon < 1 \text{ et } A = \begin{pmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Résoudre
$$Ax = b$$
 avec $b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ \Rightarrow solution exacte: $x_1 = -x_2 = \frac{1}{\varepsilon - 1}$

Le système triangulaire obtenu à partir du pivot ε petit s'écrit :

$$\begin{cases} \varepsilon x_1 + x_2 = 1 \\ x_2(1 - 1/\varepsilon) = -1/\varepsilon \end{cases} \Leftrightarrow Ux = y, Ly = b$$

avec
$$A = LU$$
, $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1/\varepsilon & 1 \end{pmatrix}$, $U = \begin{pmatrix} \varepsilon & 1 \\ 0 & 1-1/\varepsilon \end{pmatrix}$.

Conséquences du choix du petit pivot ε :

$$*l_{21} = 1/\varepsilon >> 1$$

*U a de grands et petits coef diagonaux: $u_{11} = \varepsilon$, et $u_{11}u_{22} = \det(U) = \det(A) \approx -1$ amène $u_{22} \approx -1/\varepsilon$

En format double précision standard, le plus petit nombre flottant > 1 est $1 + \varepsilon_M$ avec $\varepsilon_M = 2^{-52} \approx 2.22 \times 10^{-16}$ (epsilon machine) L'erreur d'arrondi quand on remplace $x \in IR \setminus \{0\}$ par le flottant fl(x) le plus proche vérifie $\frac{|x - fl(x)|}{|x|} \le u$ (unité d'arrondi), avec $u = \frac{\varepsilon_M}{2} \sim 10^{-16}$

Si $\varepsilon < u/2 \sim 0.5 \times 10^{-16}$ alors $1 - 1/\varepsilon = -\frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} = -1/\varepsilon$ en nombres flottants ce qui donne la solution numérique fausse $(x_1, x_2) = (0, 1)$:

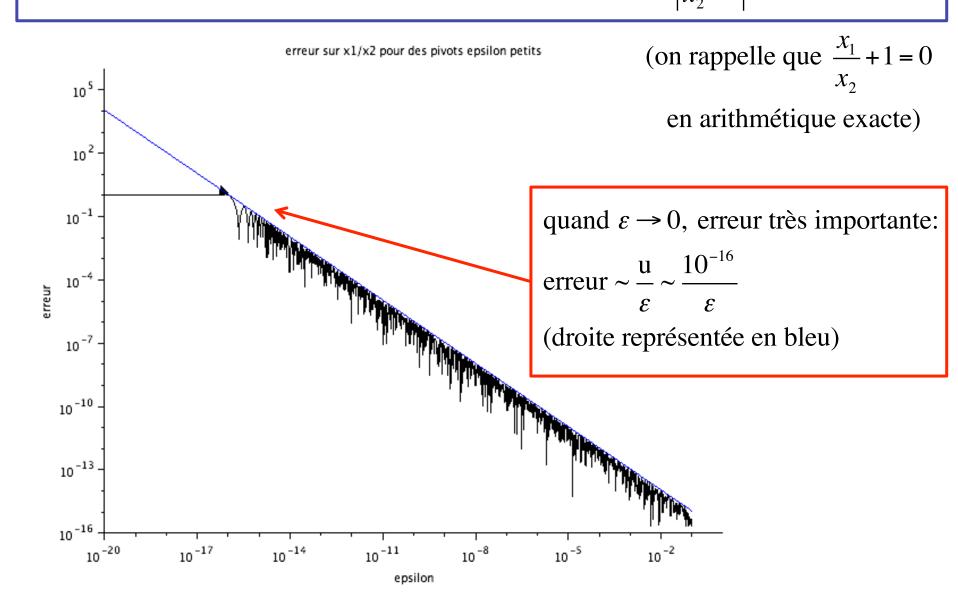
$$\begin{cases} \varepsilon x_1 + x_2 = 1 \\ x_2(1 - 1/\varepsilon) = -1/\varepsilon \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = (1 - x_2)/\varepsilon \\ x_2(-1/\varepsilon) = -1/\varepsilon \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

La valeur de x_2 est proche de la valeur exacte $x_2 = \frac{1}{1-\varepsilon}$

mais la valeur $x_1 = 0$ est très éloigné de la solution exacte $x_1 = \frac{1}{\varepsilon - 1}$.

En particulier, on obtient $\frac{x_1}{x_2} + 1 = 1$ au lieu de la valeur exacte $\frac{x_1}{x_2} + 1 = 0$.

Illustration des erreurs d'arrondi (calcul en double précision avec Scilab) : pour la solution numérique de Ux = y, on trace le graphe de $\left| \frac{x_1}{x_2} + 1 \right|$ en fonction de ε .



Sensibilité de la solution d'un système linéaire aux perturbations du système

Ce type d'analyse est très utile en particulier pour estimer les erreurs liées aux calculs en arithmétique flottante lors de la résolution numérique de systèmes linéaires.

Etant donné une matrice inversible $A \in M_n(IR)$, on compare la solution x du système Ax = b avec la solution $x + \delta x$ du système perturbé : $(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b$

Soit $\| \cdot \|$ la norme matricielle subordonnée à une norme vectorielle $\| \cdot \|$ On suppose $\| \delta A \| < (\| A^{-1} \|)^{-1}$ d'où $A + \delta A$ inversible

 $(A + \delta A = A(I + A^{-1}\delta A)$ inversible par la formule de Neumann)

Définition:

Conditionnement d'une matrice inversible $A \in M_n(IR)$

relatif à la norme
$$\|\cdot\|$$
: $\operatorname{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$

On peut montrer que:

$$\frac{\left\|\delta x\right\|}{\left\|x\right\|} \le \frac{\operatorname{cond}(A)}{1 - \left\|A^{-1}\delta A\right\|} \left(\frac{\left\|\delta A\right\|}{\left\|A\right\|} + \frac{\left\|\delta b\right\|}{\left\|b\right\|}\right)$$

donc lorsque $\delta A \rightarrow 0$:

$$\frac{\left\|\delta x\right\|}{\left\|x\right\|} \le \operatorname{cond}(A) \left(\frac{\left\|\delta A\right\|}{\left\|A\right\|} + \frac{\left\|\delta b\right\|}{\left\|b\right\|}\right) (1 + O(\left\|\delta A\right\|))$$

L'erreur relative sur la solution $x + \delta x$ du système perturbé peut donc être grande si A est mal conditionnée, i.e. si son conditionnement cond(A) est grand Remarque : on a toujours cond $(A) \ge 1$

Analyse d'erreur dans l'élimination de Gauss

Voir: N.J. Higham, Accuracy and stability of numerical algorithms, SIAM (1996)

Notations: pour $A, B \in M_N(IR)$, $(A \le B) \Leftrightarrow (a_{ij} \le b_{ij} \ \forall i, j) \text{ et } |A| = (|a_{ij}|)_{1 \le i, j \le N}$

Théorème

Si l'élimination de Gauss sur $A \in M_N(IR)$ en arithmétique flottante (avec $N < u^{-1}$)

s'effectue sans permutation, alors les matrices \hat{L}, \hat{U} obtenues vérifient $\hat{L}\hat{U} = A + \Delta A_1$,

avec
$$|\Delta A_1| \le \gamma_N |\hat{L}| |\hat{U}|, \quad \gamma_N = \frac{N u}{1 - N u}$$

Les solutions \hat{y} et \hat{x} des systèmes triangulaires $\hat{L}y = b$ et $\hat{U}x = \hat{y}$ en arithmétique flottante sont telles que $(A + \Delta A)\hat{x} = b$ avec $|\Delta A| \le \gamma_N (2 + \gamma_N) |\hat{L}| |\hat{U}|$

L'erreur par rapport à
$$x = A^{-1}b$$
 vérifie
$$\frac{\|\hat{x} - x\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \le \operatorname{cond}(A) \frac{\|\Delta A\|_{\infty}}{\|A\|_{\infty}} (1 + O(\|\Delta A\|_{\infty})), \text{ donc}$$

la borne du Théorème implique :
$$\frac{\|\hat{x} - x\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} = O\left(N \operatorname{u} \operatorname{cond}(A) \frac{\|\hat{L}\|\hat{U}\|_{\infty}}{\|A\|_{\infty}}\right) \quad \text{(avec u } \sim 10^{-16} \text{ en double précision)}$$

L'erreur
$$\frac{\|\hat{x} - x\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} = O\left(N \operatorname{u} \operatorname{cond}(A) \frac{\|\hat{L}\|\hat{U}\|_{\infty}}{\|A\|_{\infty}}\right)$$
 peut donc être grande (>> $N \operatorname{u}$)

si $\|\hat{L}\|\hat{U}\|_{\infty} >> \|A\|_{\infty}$. Cela peut se produire si des pivots $a_{kk}^{(k)}$ sont petits

$$\operatorname{car} |\hat{L}| \operatorname{et} |\hat{U}| \text{ ont de grands coefficients } (l_{i,k} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \ a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} a_{kj}^{(k)})$$

Retour à l'exemple :
$$A = \begin{pmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$
, avec nombre flottant $\varepsilon <<1$

On a
$$A = LU$$
, $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1/\varepsilon & 1 \end{pmatrix}$, $U = \begin{pmatrix} \varepsilon & 1 \\ 0 & 1-1/\varepsilon \end{pmatrix}$

$$\left| \hat{L} \right| \left| \hat{U} \right| = \begin{pmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & c \end{pmatrix} \text{ avec } c = \text{fl}(\varepsilon^{-1}) + \left| \text{fl}(1 - \text{fl}(\varepsilon^{-1})) \right| = O(\varepsilon^{-1})$$

La matrice A est bien conditionnée $(\operatorname{cond}_{\infty}(A) = |||A|||_{\infty} |||A^{-1}|||_{\infty} \approx 4 \text{ si } \varepsilon \approx 0)$

$$\Rightarrow \text{l'erreur relative } \frac{\|\hat{x} - x\|_{\infty}}{\|x\|} = O\left(\mathbf{u} \| \|\hat{L} \| \hat{U} \|_{\infty}\right) = O\left(\frac{\mathbf{u}}{\varepsilon}\right) \text{ est grande lorsque } \varepsilon \sim \mathbf{u}$$

Permutations pour améliorer la précision :

Reprenons l'exemple
$$Ax = b$$
 avec $A = \begin{pmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ et $b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

On permute cette fois les lignes 1 et 2 du système avant d'effectuer l'élimination de Gauss, pour éviter d'avoir un pivot petit :

$$Ax = b \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 + x_2 = 0 \\ \varepsilon x_1 + x_2 = 1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 + x_2 = 0 \\ x_2(1 - \varepsilon) = 1 \end{cases}$$

On a donc
$$PA = LU$$
, $P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \varepsilon & 1 \end{pmatrix}$, $U = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 - \varepsilon \end{pmatrix}$

Si $\varepsilon < u/2 \sim 0.5 \times 10^{-16}$ alors en arithmétique flottante : $1 - \varepsilon = 1$ \Rightarrow solution numérique $(x_1, x_2) = (-1, 1)$,

cette fois proche à $O(\varepsilon)$ de la solution exacte $(x_1, x_2) = \left(\frac{1}{\varepsilon - 1}, \frac{1}{1 - \varepsilon}\right)$

Elimination de Gauss avec pivot partiel

Soit $A \in M_N(\mathbb{R})$ inversible et $b \in \mathbb{R}^N$. Système linéaire à résoudre : Ax = b

• On permute la ligne 1 et la ligne i où $|a_{i1}|$ est le plus grand

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \dots + a_{1N}x_N = b_1 \\ \vdots \\ a_{N1}x_1 + \dots + a_{NN}x_N = b_N \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_{i1}x_1 + \dots + a_{iN}x_N = b_i \\ \vdots \\ a_{N1}x_1 + \dots + a_{NN}x_N = b_N \end{cases}$$

- On réalise la 1ère étape de l'élimination de Gauss
- On recommence pour les sous-systèmes de taille N-1, N-2,....2. $\Rightarrow |l_{i,k}| = \left| \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{ik}^{(k)}} \right| \le 1$

Au coût de l'élimination de Gauss hors permutations se rajoute donc une recherche de max parmi :

N coefficients
$$|a_{i1}|, (N-1)$$
 coefficients $|a_{i2}^{(2)}|, \dots, 2$ coefficients $|a_{i,N-1}^{(N-1)}|$

 \Rightarrow coût $O(N^2)$ \Rightarrow le coût total de la résolution du système reste $\approx (2/3)N^3$

Elimination de Gauss avec pivot total

Soit $A \in M_N(\mathbb{R})$ inversible et $b \in \mathbb{R}^N$. Système linéaire à résoudre : Ax = b

- On permute la ligne 1 et la ligne i où se trouve le plus grand coef $\left|a_{ij}\right|$ $(1 \le i, j \le N)$
- On permute les colonnes 1 et j de A et les inconnues x_1 et x_j

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + \ldots + a_{1N}x_N = b_1 \\ \vdots \\ a_{N1}x_1 + \ldots + a_{NN}x_N = b_N \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} a_{ij}x_j + \ldots + a_{i1}x_1 + \ldots + a_{iN}x_N = b_i \\ \vdots \\ a_{Nj}x_j + \ldots + a_{N1}x_1 + \ldots + a_{NN}x_N = b_N \end{array} \right.$$

- On réalise la 1ère étape de l'élimination de Gauss
- On recommence pour les sous-systèmes de taille N-1, N-2,....2.

Au coût de l'élimination de Gauss hors permutations se rajoute donc une recherche de max parmi :

$$N^2$$
 coefficients $\left|a_{ij}\right|, (N-1)^2$ coefficients $\left|a_{ij}^{(2)}\right|, \dots, 4$ coefficients $\left|a_{i,j}^{(N-1)}\right|$

 \Rightarrow coût $\approx (1/3)N^3 \Rightarrow$ le coût total de la résolution du système $\approx N^3$