Méthode QR

Leçons : 157 ; 162 ; 233

Références : CIARLET, *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation* (p.124)

Prérequis :

- La décomposition QR est un produit d'une matrice unitaire (i.e $Q^*Q = I_n$) et d'une matrice triangulaire supérieure dont les coefficients diagonaux sont réels et strictement positifs
- La décomposition LU est un produit d'une matrice inférieure avec des 1 sur la diagonale et d'une matrice triangulaire supérieure.
- L'application
$$\left\{ \begin{array}{ccc} U_n(\mathbb{C}) \times T_n^+(\mathbb{C}) & \to & GL_n(\mathbb{C}) \\ (Q,R) & \mapsto & QR \end{array} \right.$$
est un homéomorphisme. [1]

Introduction :

La méthode QR que nous présenterons ci-dessous est l'outil le plus utilisé pour calculer les valeurs propres d'une matrice quelconque (pas forcément symétrique). Pour les matrices symétriques, cette méthode est aussi efficace que la méthode de Jacobi. Pour tout $A \in \mathcal{G}L_n(\mathbb{C})$, on va faire converger une suite de matrices vers une matrice triangulaire ayant sur sa diagonale les valeurs propres de A.

Théorème 1. Soient $A \in GL_n(\mathbb{C})$ et $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{C}$ vérifiant
$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| > 0$$
tels qu'il existe une matrice inversible P d'inverse admettant une décomposition LU et que l'on ait
$$P^{-1}AP = D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}$$
Alors la suite définie par
$$\begin{cases} A_1 = A \\ A_{k+1} = R_k Q_k \text{ où } Q_k R_k \text{ est la décomposition } QR \text{ de } A_k \end{cases}$$
converge vers une matrice triangulaire supérieure dont la diagonale est $\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. [2]

1. $T_n^+(\mathbb{C})$ est l'ensemble des matrices triangulaires supérieures de $\mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ à coefficients diagonaux réels strictement positifs.
2. Attention, cet énoncé n'est pas complètement exacte, car les coefficients strictement au dessus de la diagonale peuvent ne pas converger (osciller par exemple), il faut comprendre que la diagonale de la suite (A_n) converge vers les valeurs propres $(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$ et les coefficients strictement sous la diagonale convergent vers 0.

Démonstration. On notera $Q^{(k)} = Q_1 \dots Q_k$ et $R^{(k)} = R_k \dots R_1$. On a alors

$$A^k = Q^{(k)} R^{(k)}$$

que l'on peut prouver par un calcul [3]. On a aussi

$$A_{k+1} = Q^{(k)*} A Q^{(k)}$$

que l'on peut prouver par récurrence [4].

L'idée est de trouver l'expression de $Q^{(k)}$ pour avoir le comportement de A_k et pour trouver $Q^{(k)}$ on va trouver la décomposition QR de A^k d'une autre manière.

Étape 1 : *Trouver la décomposition QR de A^k d'une autre manière*

On a $A^k = PD^kP^{-1}$, donc en notant QR la décomposition QR de P [5], on a

$$A^k = QRD^kLU = QR(D^kLD^{-k})D^kU$$

On veut étudier le comportement de D^kLD^{-k}. Grâce à la décroissance des modules des λ_i et du fait qu'il y a des coefficients 1 sur la diagonale de L, on a D^kLD^{-k} converge vers I_n [6]

Ainsi on a aussi $RD^kLD^{-k}R^{-1}$ qui converge vers I_n quand k tend vers l'infini. On note maintenant O_kT_k la décomposition QR de $RD^kLD^{-k}R^{-1}$. De ce fait, par l'homéomorphisme de la décomposition QR et comme O_kT_k converge vers I_n alors on a aussi O_k et T_k qui convergent vers I_n.

Pour l'instant, on a

$$A^k = (QO_k)(T_kRD^kU)$$

QO_k est bien unitaire car Q et O_k le sont. De plus, T_kRD^kU est triangulaire supérieure mais elle n'est pas à diagonale réelle strictement positive à cause de D^k et U. On factorise D (resp. U) par une matrice diagonale Δ_1 (resp. Δ_2) qui contient les $e^{i\theta}$ où θ est un argument de chaque coefficient de la diagonale de D (resp. U) [7]. Donc $D = \Delta_1|D|$ où $|D|$ est la matrice $\mathrm{diag}(|\lambda_1|, \dots, |\lambda_n|)$ et $U = \Delta_2U'$.

Si $U = \begin{pmatrix} \rho_1 e^{i\theta_1} & & (*) \\ & \ddots & \\ 0 & & \rho_n e^{i\theta_n} \end{pmatrix}$, alors on a $\Delta_2 = \begin{pmatrix} e^{i\theta_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{i\theta_n} \end{pmatrix}$ et $U' = \begin{pmatrix} \rho_1 & & (*) \\ & \ddots & \\ 0 & & \rho_n \end{pmatrix}$

Ainsi $|D|$ et U' sont bien triangulaires supérieures de diagonale réelle strictement positive.

On a alors

$$A^k = (QO_k\Delta_1^k\Delta_2)(\Delta_2^{-1}\Delta_1^{-k}T_kR\Delta_1^k|D|^k\Delta_2U')$$

Maintenant on a bien $\Delta_2^{-1}\Delta_1^{-k}T_kR\Delta_1^k|D|^k\Delta_2U') \in T_n^+(\mathbb{C})$ et on a $QO_k\Delta_1^k\Delta_2$ unitaire. Donc on a bien une décomposition QR de A^k.

Comme $A^k = Q^{(k)}R^{(k)}$ est aussi une décomposition QR de A^k, on a, par unicité de la décomposition QR,

$$Q^{(k)} = QO_k\Delta_1^k\Delta_2$$

3. $A^k = (Q_1R_1)^k = Q_1(R_1Q_1)^{k-1}R_1 = Q_1A_2^{k-1}R_1 = Q_1(Q_2R_2)^{k-1}R_1 = Q_1Q_2(R_2Q_2)^{k-2}R_2R_1 = \dots = Q_1 \dots Q_{k-1}R_{k-1}Q_{k-1}R_{k-1} \dots R_1 = Q_1 \dots Q_{k-1}A_kR_{k-1} \dots R_1 = Q_1 \dots Q_{k-1}Q_kR_kR_{k-1} \dots R_1 = Q^{(k)}R^{(k)}$

4. $A_{k+1} = R_kQ_k = Q_k^*Q_kR_kQ_k = Q_k^*A_kQ_k = Q_k^*Q^{(k-1)*}AQ^{(k-1)}Q_k = Q^{(k)*}AQ^{(k)}$

5. puisque P est inversible (par l'homéomorphisme de la proposition 1)

6. Le calcul des coefficients de D^kLD^{-k} donne

$$(D^kLD^{-k})_{ij} = \begin{cases} 0 \text{ si } i < j \\ 1 \text{ si } i = j \\ \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^k \text{ si } i > j \end{cases}$$

7. c'est possible car U est inversible puisque P^{-1} l'est donc aucun des coefficients diagonaux de U est nul et les λ_i sont supposés de module strictement positifs

Étape 2 : *Convergence de A_k*

On a alors

$$A_{k+1} = (QO_k\Delta_1^k\Delta_2)^* A(QO_k\Delta_1^k\Delta_2) = (\Delta_1^k\Delta_2)^* O_k^* Q^* AQO_k(\Delta_1^k\Delta_2)$$

Or

$$Q^*AQ = Q^*QRDR^{-1}Q^{-1}Q = RDR^{-1}$$

en se rappelant que $P = QR$ et $A = PDP^{-1}$. De plus comme R est triangulaire supérieure on a

$$RDR^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & (*) \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

Nous avons vu que O_k tend vers I_n donc on a

$$O_k^*Q^*AQO_k \text{ qui converge vers } \begin{pmatrix} \lambda_1 & & (*') \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

De plus, la conjugaison par $\Delta_1^k\Delta_2$ ne changera ni les coefficients nuls sous la diagonale ni la diagonale. Donc (A_k) converge bien vers une matrice triangulaire supérieure dont la diagonale est $\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. □

Remarques :

— Si A est réelle et satisfait les hypothèses, alors les valeurs propres sont réelles et toutes les matrices que l'on considère sont réelles.

— Attention, si l'on deux valeurs propres de même module, le théorème est faux, par exemple, si A est orthogonale, alors $A_k = A$ pour tout k et donc elle ne converge pas vers une matrice triangulaire supérieure a priori. Cependant, si plusieurs valeurs propres ont même module, on va avoir une convergence vers une matrice triangulaire par blocs et chaque bloc concerne les valeurs propres d'un même module.

— En pratique, on met la matrice A sous forme de Hessenberg (extension au cas non symétrique de Householder) car la suite des (A_k) restera sous forme de Hessenberg, ce qui simplifiera les calculs.

— Pour trouver les vecteurs propres de A, on met A sous forme de Hessenberg : $A = PHP^{-1}$, on aura alors

$$A_{k+1} = (Q_1Q_2\ldots Q_k)^{-1}H(Q_1Q_2\ldots Q_k)$$

On aura alors $Q_1Q_2\ldots Q_k$ qui convergera vers une matrice contenant les vecteurs propres en colonne