6 Méthode QR pour les valeurs propres

Leçons 157, 162, 233

Ref : [Ciarlet] 6.3

Ce développement consiste à démontrer une méthode de calcul des valeurs propres d'une matrice. Elle englobe des cas plus généraux que la méthode de Jacobi par exemple, qui ne fonctionne que pour des matrices symétriques, et elle est (dans ces cas-là) au moins aussi efficace que celle-ci.

Théorème 1 Soit $A \in GL_n(\mathbb{C})$ une matrice dont les valeurs propres sont échelonnées en degré ; on les note $\lambda_1, .., \lambda_n$ et on peut donc supposer

$$|\lambda_1| > .. > |\lambda_n| > 0.$$

On se donne aussi la matrice $P \in GL_n(\mathbb{C})$ telle que $A = PDP^{-1}$, avec D diagonale avec coefficients λ_i (rangés dans l'ordre). On suppose que P^{-1} admet une décomposition LU. Alors la suite de matrices $(A_k)_{k\geq 1}$ définie par

$$\begin{cases} A_1 = A \\ A_{k+1} = R_k Q_k \text{ en notant } A_k = Q_k R_k \text{ la décomposition QR de } A_k, \ \forall k \geq 1 \end{cases}$$

converge vers une matrice triangulaire supérieure dont les coefficients diagonaux sont les valeurs propres $\lambda_1, .., \lambda_n$ de A.

Remarque. On rappelle que l'on dit que $M \in GL_n(\mathbb{C})$ admet une décomposition LU s'il existe L triangulaire inférieure avec des 1 sur la diagonale et U triangulaire supérieure telles que $M = LU$. C'est vrai si les mineurs principaux de M sont non nuls.

Démonstration.

Étape 1. Deux identités matricielles [1]

On note, pour tout entier $k \geq 1$,

$$\begin{cases} Q^{(k)} := Q_1..Q_k \\ R^{(k)} := R_k..R_1 \end{cases}$$

On a alors une première identité qui donne la décomposition QR de A^k

$$A^k = Q^{(k)} R^{(k)}. \tag{1}$$

En effet, on a

$$A^k = (Q_1R_1)^k = Q_1(R_1Q_1)^{k-1}R_1 = Q_1A_2^{k-1}R_1 = Q_1Q_2(R_2Q_2)^{k-2}R_2R_1 = .. = Q_1..Q_kR_k..R_1,$$

d'où le résultat. On montre également par récurrence le résultat suivant :

$$A_{k+1} = Q^{(k)*} A Q^{(k)}. \tag{2}$$

Pour $k = 1$, on a bien $A_2 = R_1Q_1 = Q_1^*Q_1R_1Q_1 = Q_1^*AQ_1$, et si k est un entier plus grand que 1, on a bien

$$\begin{array}{rcll} A_{k+2} & = & R_{k+1}Q_{k+1} & \text{par définition de la suite } (A_k)_{k\geq 1} \\ & = & Q_{k+1}^*Q_{k+1}R_{k+1}Q_{k+1} & \text{car } Q_{k+1} \text{ est unitaire} \\ & = & Q_{k+1}^*A_{k+1}Q_{k+1} & \\ & = & Q_{k+1}^*Q^{(k)*}AQ^{(k)}Q_{k+1} & \text{par hypothèse de récurrence} \\ A_{k+2} & = & Q^{(k+1)*}AQ^{(k+1)} & \end{array}$$

Étape 2. Une autre expression de la décomposition QR de A^k.

On cherche ici à donner une autre expression des matrices $Q^{(k)}$ puisque l'on voit via (2) qu'elles vont diriger le comportement asymptotique de la suite $(A_k)_{k\geq 1}$. Pour cela, on utilise l'unicité de la décomposition QR : trouver une "autre" décomposition de A^k que celle donnée par (1) nous donnera par unicité une autre formule pour $Q^{(k)}$. On note alors $P = QR$ la décomposition QR de P (existe car

1. Si l'on a peur de manquer de temps, on peut simplement évoquer que la première se montre par un calcul direct et la seconde par récurrence.

P est inversible) et $P^{-1} = LU$ la décomposition LU de son inverse, dont l'existence fait l'objet d'une hypothèse du théorème. Comme A est inversible, D l'est aussi et son inverse est la matrice D^{-1} diagonale à coefficients λ_i^{-1}. On a alors

$$A^k = PD^kP^{-1} = QRD^kLU = QR(D^kLD^{-k})D^kU.$$

Mais on a pour tout $(i, j) \in [\![1, n]\!]^2$

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

Mais comme $|\lambda_i| < |\lambda_j|$ si $i > j$, cette matrice tend vers l'identité. Ainsi, par continuité du produit matriciel, $RD^kLD^{-k}R^{-1}$ converge aussi vers l'indentité. Comme cette matrice est inversible, elle admet une décomposition QR, que l'on note O_kT_k, et comme la décomposition QR est un homéomorphisme [2], O_k et T_k convergent vers l'identité. De plus, on rappelle que l'on a maintenant

$$A^k = QO_kT_kRD^kU.$$

Le facteur QO_k est unitaire puisque Q et O_k le sont. Le second facteur T_kRD^kU est bien triangulaire supérieur, mais ses coefficients diagonaux peuvent être non réels strictement positifs [3]. Cependant, si l'on note Θ_k la matrice diagonale dont les coefficients diagonaux sont les $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_j}$, où les θ_j sont les arguments des coefficients diagonaux de T_kRD^kU, on en déduit que $(QO_k\Theta_k^*)(\Theta_kT_kRD^kU)$ est la décomposition polaire de A^k. Donc, par unicité, on a

$$Q^{(k)} = QO_k\Theta_k.$$

Étape 3. Convergence de la suite $(A_k)_{k\geq 1}$.

On a maintenant, en utilisant le résultat de l'étape précédente avec (2) :

$$A_{k+1} = \Theta_k^*O_k^*Q^*AQO_k\Theta_k.$$

Or on rappelle que $A = QRDR^{-1}Q^{-1}$, donc on en déduit

$$A_{k+1} = \Theta_k^*O_k^*RDR^{-1}O_k\Theta_k.$$

Or RDR^{-1} est triangulaire supérieur avec coefficients diagonaux égaux à λ_i [4]. Ainsi, par continuité de la mutliplication matricielle et comme les O_k sont unitaires et convergent vers l'identité, la suite définie par $D^{(k)} := O_k^*RDR^{-1}O_k$ tend vers cette même matrice. Or $A_{k+1} = \Theta_k^*D^{(k)}\Theta_k$, et comme Θ_k est diagonale à coefficients diagonaux de module 1, A_{k+1} a bien les mêmes coefficients diagonaux que $D^{(k)}$. En passant à la limite, on voit que A_k tend bien vers une matrice triangulaire supérieure de la forme voulue. □

2. La démonstration similaire à celle du fait que la décomposition polaire est homéomorphisme, présentée dans le développement 6 d'algèbre.

3. On rappelle que la décomposition QR donne l'unicité en ajoutant la condition de diagonale strictement positive seulement pour R. Si ses coefficients diagonaux peuvent être quelconques, il existe une infinité de décompositions possibles.

4. Les λ_i sont toujours triés par module décroissant. Cela se voit en faisant le calcul explicite des coefficients diagonaux de RDR^{-1}.