



HAL
open science

De quelques méthodes de calcul de valeurs propres de matrices de grande taille

Mamadou Diamoutani

► **To cite this version:**

Mamadou Diamoutani. De quelques méthodes de calcul de valeurs propres de matrices de grande taille. Modélisation et simulation. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 1986. Français. NNT: . tel-00321850

HAL Id: tel-00321850

<https://theses.hal.science/tel-00321850v1>

Submitted on 16 Sep 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE

PRÉSENTÉE À

L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

POUR OBTENIR

LE TITRE DE DOCTEUR DE 3ÈME CYCLE MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES
(OPTION ANALYSE NUMÉRIQUE)

PAR

Mamadou DIAMOUTANI

DE QUELQUES METHODES
DE CALCUL DE VALEURS PROPRES
DE GRANDES MATRICES

SOUTENUE LE

27 OCTOBRE 1986

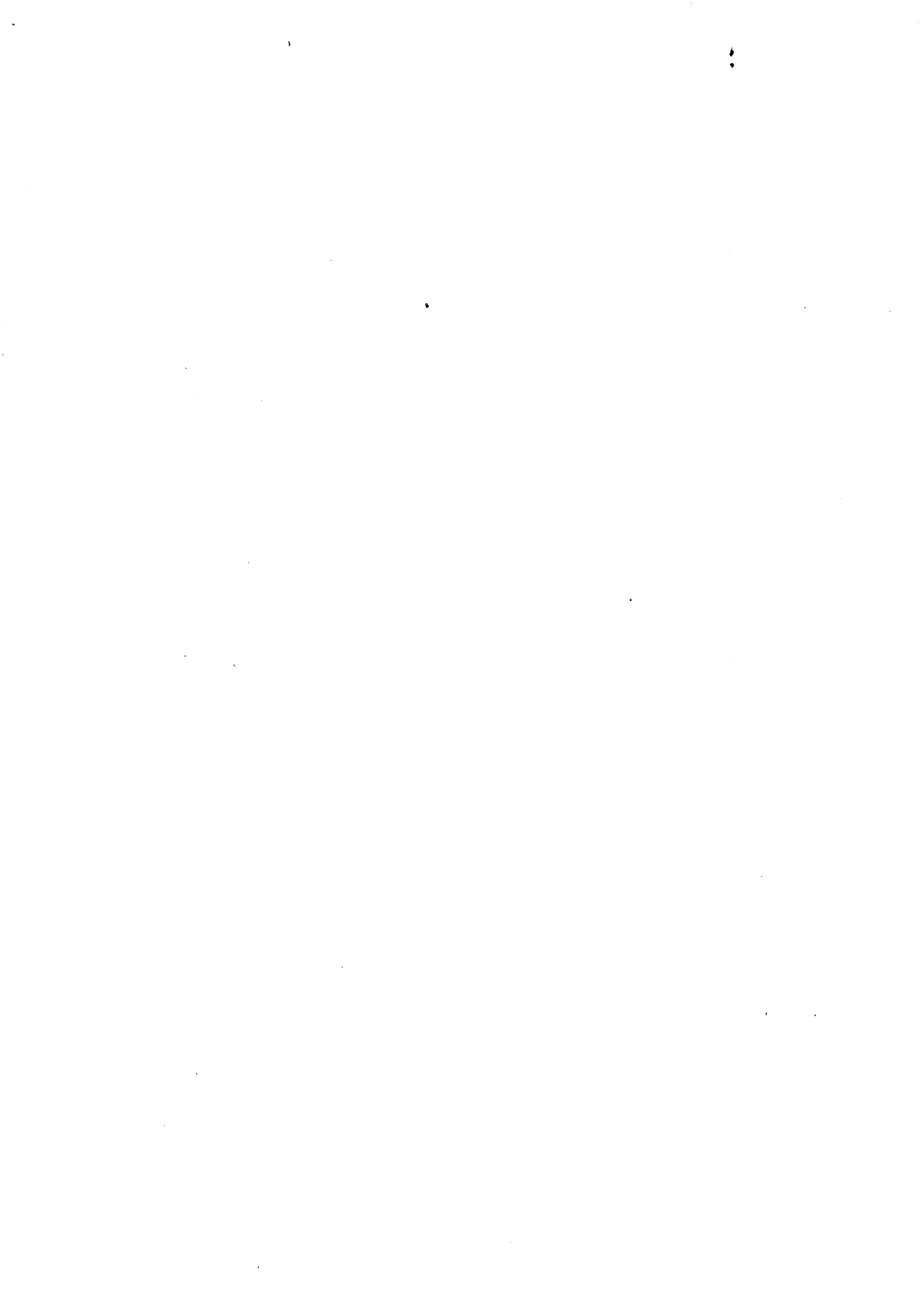
DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

JURY

Monsieur	F. ROBERT	Président
Mme	F. CHATELIN	Examineurs
M.	P.J. LAURENT	
Mme	G. SAUCIER	



*A mes parents
et à la mémoire de mon ami
Sanogo Mahamoudou*



J'exprime ma profonde gratitude au Professeur F. CHATELIN - qui a dirigé ce travail - pour ses conseils, ses encouragements ainsi que pour la sympathie qu'elle m'a témoignée.

Je tiens à remercier le Professeur F. ROBERT pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider le jury.

Je suis très sensible à l'honneur que me font les professeurs P.J. LAURENT et G. SAUCIER en acceptant de faire partie de ce jury.

Je remercie toute l'équipe d'Algorithmique Mathématique (TIM3) dont j'ai utilisé les matériels informatiques durant toute la préparation de cette thèse. Que Claire DI CRESCENZO et André EBERHARD trouvent ici mes vifs remerciements pour leurs précieux conseils en ce qui concerne la programmation.

Je remercie tous les membres du L.C.S. (Laboratoire Circuits et Systèmes) pour tout ce qu'ils ont fait et voulu faire pour moi lors de mon séjour dans ce laboratoire.

Enfin, je remercie DACTYL ASSISTANCE pour le très grand soin qui a été apporté à la dactylographie du manuscrit, ainsi que toute l'équipe de reprographie qui en a assuré le tirage.



TABLE DES MATIERES

	<u>Pages</u>
NOTATIONS	1
INTRODUCTION	3

PREMIERE PARTIE

METHODES DE LA PUISSANCE ET DES ITERATIONS SIMULTANEEES EN PRESENCE DE VALEURS PROPRES DISTINCTES DE MEME MODULE

I.	METHODE DE LA PUISSANCE	
	I.1 Un cas de non convergence	9
	I.2 Calcul des deux valeurs propres dominantes	11
	I.3 Calcul des vecteurs propres associés aux deux valeurs propres dominantes	12
	I.4 Application	14
	I.5 Résultats numériques	15
II.	ITERATIONS SIMULTANEEES	
	II.1 Itération de sous-espace : rappels	19
	II.2 Cas de valeurs propres distinctes de même module	20
	II.3 Résultats numériques	24

DEUXIEME PARTIE

ACCELERATION DE TCHEBYCHEFF ET ALGORITHME DE LANCZOS : CAS D'UNE MATRICE SYMETRIQUE (DEFINIE POSITIVE)

I.	ACCELERATION DE TCHEBYCHEFF	
----	-----------------------------	--

I.1	Principe de la méthode	33
I.2	Cas d'une matrice symétrique définie positive	37
II.	ALGORITHME DE LANCZOS SYMETRIQUE	
II.1	Algorithme de Lanczos	48
II.2	La perte d'orthogonalité des vecteurs de Lanczos ...	51
II.3	Comment maintenir l'orthogonalité globale des vecteurs de Lanczos	53
II.4	Le critère de convergence	55

TROISIEME PARTIE

ITERATIONS SIMULTANEEES POUR UNE MATRICE NON SYMETRIQUE

1.	DEUX DIFFICULTES MAJEURES	61
2.	RECHERCHE D'UNE BASE ORTHONORMEE DU SOUS-ESPACE DOMINANT PAR UTILISATION DE LA FORME DE SCHUR	62
3.	APPROXIMATION DES ELEMENTS PROPRES DOMINANTS	63
4.	CALCUL DE LA FORME DE SCHUR ET DE SES ELEMENTS PROPRES ...	65
5.	EXEMPLE	67
	CONCLUSION	69
	BIBLIOGRAPHIE	73

NOTATIONS

$A = (a_{ij})$	Matrice d'éléments a_{ij} , i^e ligne, j^e colonne $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq m$, application linéaire de C^n dans C^m
$A^* = (\bar{a}_{ji})$	Matrice transposée-conjuguée
$A^H = (a_{ji})$	Matrice transposée
$x(x_i)_1^n$	x vecteur de C^n de coordonnées $\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$
$\{x_1, \dots, x_r\} = \{x_i\}_1^r$	Ensemble de r vecteurs
$A = [a_1, \dots, a_m]$	Matrice de vecteurs colonnes $\left\{ a_i \right\}_1^m$
$A_{ij}^{(k)}$	Elément en i^e ligne et j^e colonne de A à la k^e itération
λ_i	Valeur propre simple de A
μ_i	Valeur propre multiple de A
$sp(A)$	Spectre de A
ϕ_i	Vecteur propre de A associé à λ_i ou μ_i
$\text{lin}(x_1, \dots, x_r)$	Sous-espace engendré par $\{x_i\}_1^r$
$\text{lin } X$	Sous-espace engendré par les colonnes de la matrice X



INTRODUCTION



Dans les domaines très divers où intervient un calcul d'éléments propres d'une matrice de grande taille $A(n,n)$ (mécanique, chimie, économie, statistique, etc...), les utilisateurs sont le plus souvent intéressés par seulement quelques-unes des valeurs propres extrêmes de A , c'est-à-dire les plus grandes ou les plus petites (en module) et éventuellement les directions propres (normalisées) correspondantes. Dans ce travail, on s'intéresse à quelques algorithmes de calcul de quelques éléments propres d'une matrice de grande taille. Ces algorithmes correspondent tous à des méthodes de projection sur un espace de dimension au moins égale au nombre d'éléments propres cherché, en général très petit par rapport à n .

Le premier chapitre traite des méthodes de la puissance et des itérations simultanées en présence de valeurs propres distinctes de même module. L'algorithme de la puissance est une des méthodes les plus utilisées pour le calcul de la plus grande valeur propre (en module) et d'un vecteur propre (normalisé) associé d'une matrice A diagonalisable ou non. Cet algorithme, on le sait, ne converge pas lorsque les valeurs propres dominantes de A sont complexes conjuguées ou plus généralement distinctes et de même module. Dans ce cas, on utilise la technique consistant à itérer simultanément sur deux vecteurs ; nous montrons, dans le cas d'une matrice réelle, partant d'une hypothèse simple entre les deux plus grandes valeurs propres, qu'il est possible de calculer celles-ci ainsi que des vecteurs propres associés en itérant sur un seul vecteur. Le comportement de cet algorithme (sous les conditions ci-dessus) s'étend au cas des itérations simultanées.

Le second chapitre traite, du point de vue pratique, deux algorithmes pour des matrices symétriques (définies positives) : les itérations de Tchebycheff simultanées pour la recherche de quelques valeurs propres dominantes et des vecteurs propres associés et la méthode de Lanczos pour les éléments propres extrêmes. Il s'inscrit dans le cadre de l'aspect numérique - sur lequel a déjà travaillé D. BELAID [2] sous la direction de F. CHATELIN - de l'étude d'un coprocesseur statistique spécialisé en analyse des données dans le laboratoire LCS (Laboratoire Circuits et Systèmes dirigé par le Professeur G. SAUCIER) à l'initiative des Professeurs J.R. BARRA, F. CHATELIN, G. SAUCIER [1].

Dans le troisième chapitre, nous abordons le problème d'itérations simultanées pour une matrice non symétrique ; ici, le calcul des directions propres associées aux valeurs propres dominantes conduit à la recherche de la forme de Schur de la matrice représentant la restriction de A à l'espace sur lequel on projette.

Des résultats numériques sont présentés dans chaque chapitre.

PREMIERE PARTIE

MÉTHODES DE LA PUISSANCE
ET DES ITÉRATIONS SIMULTANÉES
EN PRÉSENCE DE VALEURS PROPRES DISTINCTES
DE MÊME MODULE



I. METHODE DE LA PUISSANCE

I.1 UN CAS DE NON CONVERGENCE

L'algorithme de la puissance est :

$$\left| \begin{array}{l} u \neq 0, \quad q_0 = \frac{u}{\|u\|} \\ \text{pour } k \geq 1 \quad \text{faire} \\ q_k = \frac{A^{q_{k-1}}}{\|A^{q_{k-1}}\|} \end{array} \right.$$

Si

$$|\lambda_1| > |\mu_2| \geq \dots \geq |\mu_n|$$

alors

$$\|q_k - \epsilon_k \phi_1\| = O\left(\left|\frac{\mu_2}{\lambda_1}\right|^k\right)$$

avec $|\epsilon_k| = 1$ sous la condition nécessaire et suffisante que $\psi_1^* u \neq 0$ où ψ_1 désigne le vecteur propre à gauche (normalisé) associé à λ_1 ($\psi_1^* A = \lambda_1 \psi_1^*$).

Supposons que la matrice A est diagonalisable et que ses valeurs propres sont telles que :

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\mu_3| \geq \dots \geq |\mu_n|, \quad \lambda_1 = e^{i\theta} \lambda_2, \quad 0 < \theta < 2\pi$$

On a :

Proposition 1

$$\left| \begin{array}{l} \text{S'il existe un rationnel } p = \frac{r}{s} \text{ irréductible tel que } \theta = \frac{2\pi}{p}, \text{ alors} \\ \text{la méthode de la puissance appliquée à } A \text{ à partir de} \\ u = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i \end{array} \right.$$

tel que $\alpha_1 \neq 0$, génère r sous-suites convergeant respectivement vers

$$e^{2ik\frac{\pi}{p}} \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2, \quad k = 1, 2, \dots, r$$

Preuve

Pour $u = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i$

on a :

$$\Lambda^k u = \lambda_2^k \left[e^{2ik\frac{\pi}{p}} \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2 + \sum_{j=3}^n \left(\frac{\mu_j}{\lambda_2}\right)^k \alpha_j \phi_j \right]$$

et

$$e^{2ik\frac{\pi}{p}} \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2 = e^{2ik\pi\frac{s}{r}} \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2, \quad k = 1, 2, \dots, r$$

Remarques

1. Si $p = 1$, on retrouve la convergence de la méthode dans le cas d'une valeur propre dominante multiple semi-simple.
2. Supposons λ_1 et λ_2 complexes conjuguées : $\lambda_1 = \rho e^{i\alpha}$ et $\lambda_2 = \rho e^{-i\alpha}$.
S'il existe p tel que $\alpha = \frac{\pi}{p}$ alors il existe p (resp. r) sous-suites convergentes si p est entier (resp. $p = \frac{r}{s}$ rationnel irréductible).
En effet, dans ce cas $\theta = \frac{2\pi}{p}$.

Dans toute la suite, on supposera p entier.

Il s'agit maintenant de voir comment, sous les hypothèses de la proposition précédente, on peut calculer effectivement λ_1 et λ_2 ainsi que ϕ_1 et ϕ_2 .

I.2 CALCUL DES VALEURS PROPRES DOMINANTES λ_1 ET λ_2

On a :

Proposition 2

Tout couple de vecteurs distincts choisi parmi les r vecteurs limites permet de construire une matrice 2×2 dont les valeurs propres sont λ_1 et λ_2 .

Preuve

Elle est basée sur la projection sur le sous-espace $\text{lin}(\phi_1, \phi_2)$ engendré par ϕ_1 et ϕ_2 .

Soit
$$v_m = e^{2i\pi \frac{m}{r}} \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2$$

et
$$v_\ell = e^{2i\pi \frac{\ell}{r}} \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2$$

deux vecteurs-limites distincts ($m \neq \ell$)

Soit $M_{m,\ell}$ la matrice obtenue par orthonormalisation de $[v_m, v_\ell]$.

$\text{lin}(\phi_1, \phi_2)$ étant invariant par A , la matrice 2×2 $B_{m,\ell} = M_{m,\ell}^* A M_{m,\ell}$ représente alors la restriction de A à $\text{lin}(\phi_1, \phi_2)$ dans la base orthonormée formée par les colonnes de $M_{m,\ell}$.

Par suite
$$\text{sp}(B_{m,\ell}) = \{\lambda_1, \lambda_2\}$$

Remarques

1. En itérant simultanément sur 2 vecteurs et en orthonormalisant à chaque pas les deux colonnes d'une matrice $n \times 2$, on peut former une matrice 2×2 dont les valeurs propres sont λ_1 et λ_2 mais ceci est

plus coûteux que le procédé que nous venons d'utiliser où l'on itère sur un seul vecteur avec une seule orthonormalisation des colonnes d'une matrice $n \times 2$.

2. En pratique, on ne connaît pas a priori la forme de θ , et même si θ est un multiple de π , on ne peut pas déterminer à l'avance p . Mais la proposition 2 rend non nécessaire la connaissance de p pour le calcul de λ_1 et λ_2 .

I.3 CALCUL DE ϕ_1 ET ϕ_2 - VECTEURS PROPRES ASSOCIES A λ_1 ET λ_2

Faisons tout de suite la

Remarque

S'il existe un entier p pair tel que $\theta = \frac{2\pi}{p}$ on obtient ϕ_1 et ϕ_2 par addition et soustraction des vecteurs-limites de rangs m et $m + \frac{p}{2}$ puisque

$$e^{2i\pi\frac{m}{p}} + e^{2i\pi\frac{m + \frac{p}{2}}{p}} = 0$$

Exemple

Si $p = 2$, on obtient deux sous-suites convergeant respectivement

$$\text{vers } v_1 = \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2 \quad \text{et} \quad v_2 = -\alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2$$

On a :

$$v_1 + v_2 = 2 \alpha_2 \phi_2 \quad \text{et} \quad v_1 - v_2 = 2 \alpha_1 \phi_1$$

Restreignons-nous maintenant au cas d'une matrice réelle. La condition $|\lambda_1| = |\lambda_2|$ avec $\lambda_1 \neq \lambda_2$ implique seulement deux cas :

- Les valeurs propres λ_1 et λ_2 sont opposées : $\lambda_1 = -\lambda_2$. Dans ce cas $p = 2$ et la remarque précédente s'applique.

- les valeurs propres λ_1 et λ_2 sont complexes conjuguées : $\lambda_2 = \bar{\lambda}_1$.
Il suffit de calculer ϕ_1 car si $\phi_1(x_i)_{i=1}^n$ alors $\phi_2(\bar{x}_i)_{i=1}^n$.

pour k assez grand, on a :

$$q_k = \alpha_1 \phi_1 + \bar{\alpha}_1 \bar{\phi}_1$$

En posant

$$\lambda_1 = a_1 + ib_1 \quad \text{et} \quad \alpha_1 \phi_1 = x_1 + iy_1 \quad \text{avec} \quad (x_1, y_1) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$$

il vient

$$Aq_k = 2 \operatorname{Re}(\alpha_1 \lambda_1 \phi_1) = 2(a_1 x_1 - b_1 y_1)$$

$$\text{Mais } 2x_1 = q_k \quad \text{donc} \quad Aq_k = a_1 q_k - 2b_1 y_1$$

et

$$\alpha_1 \phi_1 = \frac{1}{2} q_k + i \left[\frac{1}{2b_1} (a_1 q_k - Aq_k) \right]$$

soit

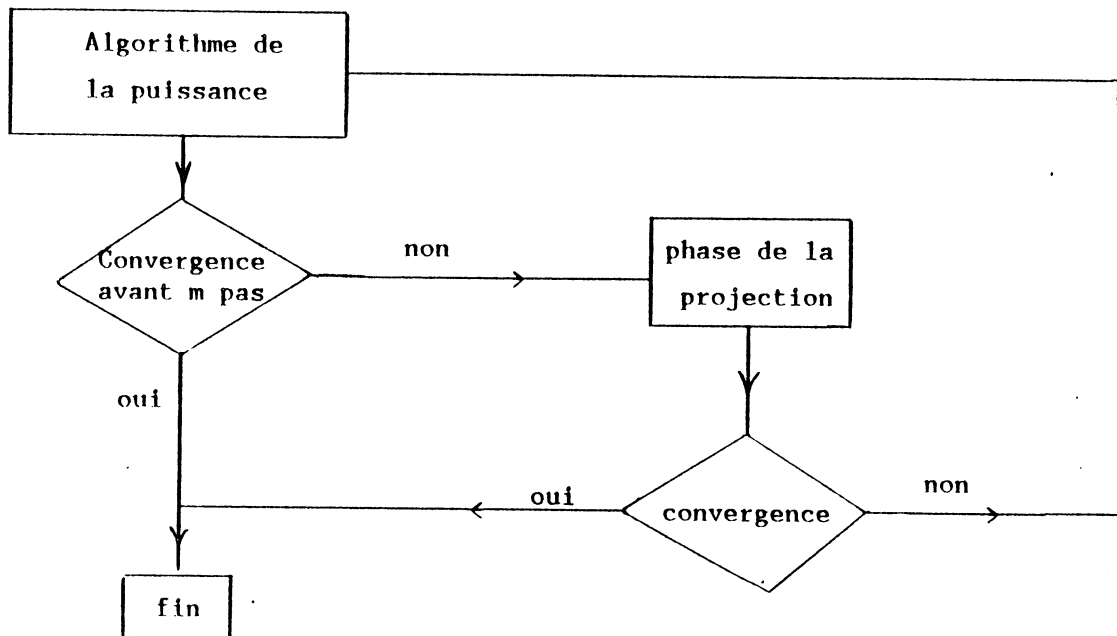
$$2\alpha_1 b_1 \phi_1 = b_1 q_k + i(a_1 q_k - Aq_k)$$

La direction propre ϕ_1 s'obtient donc comme $b_1 q_k + i(a_1 q_k - Aq_k)$.

Voyons maintenant la mise en pratique de tout ce qui précède.

I.4 APPLICATION

On procèdera suivant le schéma suivant :



Décrivons succinctement la phase de projection. Elle consiste à :

1. Orthonormaliser la matrice $[q_k, q_{k+1}]$
(soit $V_{k,k+1}$ la matrice obtenue)
2. Calculer le spectre de $V_{k,k+1}^t A V_{k,k+1}$ par la résolution de l'équation : polynôme caractéristique = 0
(soit $\Delta_{k,k+1}$ le discriminant de l'équation)
et faire les tests :
 - si $\Delta_{k,k+1} < 0$: $\lambda_2 = \bar{\lambda}_1$
on calcule ϕ_1 (d'où ϕ_2)

- si $\Delta_{k,k+1} = 0$: $\lambda_1 = \lambda_2$ mais la précision relative souhaitée sur le vecteur propre dans l'algorithme de la puissance n'est pas atteinte.
- si $\Delta_{k,k+1} > 0$: si $\lambda_1 = -\lambda_2$ calculer ϕ_1 et ϕ_2 sinon la précision relative souhaitée n'est pas atteinte

Remarques

1. On gardera en mémoire à chaque pas d'itération les vecteurs $q_k, q_{k+1} = Aq_k / \|Aq_k\|, q'_{k+1} = q_{k+1} - (q_{k+1}^t q_k)q_k$
2. La matrice $V_{k,k+1}^t A V_{k,k+1}$ n'est pas formée explicitement.

I.5 RESULTATS NUMERIQUES

Dans les exemples 1 et 2 ci-dessous, nous donnons les vecteurs limites v ainsi que les matrices d'ordre 2 construites à partir de ces vecteurs et dont les valeurs propres sont λ_1 et λ_2 .

Pour ces matrices 2 x 2, la notation

$$\begin{matrix} a & b & c & d \\ e & f & g & h \end{matrix} \text{ signifie } \begin{pmatrix} a+ib & c+id \\ e+if & g+ih \end{pmatrix}$$

Exemple 1

$$A = \begin{pmatrix} -1 & -i\sqrt{3} & i & -1 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} ; \quad \lambda_1 = -1 - i\sqrt{3} = 2 e^{i\frac{4\pi}{3}} = \lambda_2 e^{i\frac{4\pi}{3}} \Rightarrow p = \frac{3}{2}$$

on a 3 sous-suites convergentes

VECTEUR DE DEPART

1.000000000000000E+000	1.000000000000000E+000
1.000000000000000E+000	-1.000000000000000E+000
-1.000000000000000E+000	0.000000000000000E+000

LES VECTEURS-LIMITES SONT :

v
1

6.29928526927696E-001	-4.48179616961201E-001
4.48511472486053E-001	-4.48511472486053E-001
-3.52285558190775E-090	0.000000000000000E+000

v
2

-5.98058443018365E-001	-1.21385055815914E-001
5.60174868661125E-001	-5.60174868661125E-001
1.09998031486734E-090	0.000000000000000E+000

v
3

3.75942983475247E-001	6.81078954530038E-001
4.44296258633809E-001	-4.44296258633809E-001
-2.18109185991546E-091	0.000000000000000E+000

LES MATRICES D'ORDRE 2 SONT :
B(1,2) =

2.88491716941450E-001	-5.51659453696058E-001	-1.85111127497614E+000	1.05336234410423E+000
-6.74372046859075E-091	-1.47536145110289E+000	7.11508283058551E-001	-1.18039135430394E+000

B(1,3) =

2.88491716941450E-001	-5.51659453696058E-001	-1.33170878743273E-002	2.12979056141469E+000
1.27770049649888E+000	-7.37680725413733E-001	7.11508283058551E-001	-1.18039135430394E+000

B(2,3) =

4.79761133408457E-001	-9.12050433014875E-001	-1.12808492682869E+000	6.52509941757757E-001
1.11022302462516E-016	-2.30143419295066E+000	5.20238866591543E-001	-8.20000374985126E-001

Exemple 2

$$A = \begin{pmatrix} 4-3i & -3+4i & -4+6i \\ -2 & 3 & 2 \\ 3-3i & -3+3i & -3+6i \end{pmatrix} \quad \text{sp}(A) = \left\{ 3i ; 3 ; 1 \right\} ; \lambda_1 = 3i ; \lambda_2 = 3$$

$$\lambda_1 = \lambda_2 \quad e^{i\frac{\pi}{2}} \Rightarrow p = 4$$

On a 4 sous-suites
(voir page 18)

Exemple 3

$$A = \begin{pmatrix} 2.2 & -0.8 & 0.4 & -0.4 \\ -0.4 & 1.6 & 0.2 & -0.2 \\ -2 & 2 & 1 & -4 \\ -3.6 & 2.4 & -1.2 & -1.8 \end{pmatrix} \quad \text{sp}(A) = \left\{ 3 ; -3 ; 2 ; 1 \right\} \quad p = 2$$

On a 2 sous-suites convergentes

Pour $u = (1,1,1)^t$, on a

$$v_1 \begin{vmatrix} 1.15470053837926 \times 10^{-1} \\ 0 \\ 8.08290376865476 \times 10^{-1} \\ 5.77350269189625 \times 10^{-1} \end{vmatrix} \quad v_2 \begin{vmatrix} 1.15470053837926 \times 10^{-1} \\ 0 \\ -5.77350269189625 \times 10^{-1} \\ -8.08290376865476 \times 10^{-1} \end{vmatrix}$$

La différence et la somme de v_1 et v_2 sont des vecteurs propres associés à -3 et 3.

Exemple 4

$$A = \begin{pmatrix} 8 & -1 & -5 \\ -4 & 4 & -2 \\ 18 & -5 & -7 \end{pmatrix} \quad \text{sp}(A) = \left\{ 2 \pm 4i ; 1 \right\}$$

Ici, il n'existe pas de sous-suite convergente car $\theta \equiv 2/\text{Arcos}(\frac{\sqrt{5}}{5})$, néanmoins le calcul des 2 éléments propres dominants est possible par le schéma de la page 14.

On obtient :

$$\phi_1 \begin{bmatrix} -1.82566137215811 & -1.7321780599334 & i \\ -0.093483312224 & -3.55783943209151 & i \\ -3.55783943209151 & +0.083483312224 & i \end{bmatrix} , \phi_1 \text{ associé à } \lambda_1 = 2 + 4i$$

VECTEUR DE DEPART

1.000000000000000E+000	0.000000000000000E+000
1.000000000000000E+000	-1.000000000000000E+000
1.000000000000000E+000	1.000000000000000E+000

LES VECTEURS-LIMITES SONT :

v
1

-4.85071250072668E-001	4.85071250072664E-001
2.42535625036333E-001	1.60560792675166E-016
-4.85071250072668E-001	4.85071250072664E-001

v
2

-6.54653670707976E-001	-2.18217890235994E-001
2.18217890235993E-001	1.33187595891713E-016
-6.54653670707976E-001	-2.18217890235994E-001

v
3

2.60037031374300E-015	-6.66666666666666E-001
3.33333333333334E-001	1.97854263002185E-016
2.60037031374300E-015	-6.66666666666666E-001

v
4

4.47213595499955E-001	4.47213595499961E-001
4.47213595499958E-001	2.97904098389672E-016
4.47213595499955E-001	4.47213595499961E-001

LES MATRICES D'ORDRE 2 SONT :
B(1,2) =

1.58823529411765E+000	2.82352941176470E+000	5.99792351611709E+000	2.20976129541155E+000
1.22124532708767E-015	-7.89200462646983E-001	1.41176470588236E+000	1.76470588235297E-001

B(1,3) =

1.58823529411765E+000	2.82352941176470E+000	2.67863519449558E+000	5.80370958807373E+000
-5.58048998853243E-001	-5.58048998853242E-001	1.41176470588235E+000	1.76470588235298E-001

B(1,4) =

1.58823529411765E+000	2.82352941176470E+000	-2.20976129541154E+000	5.99792351611709E+000
-7.89200462646983E-001	4.64905891561784E-016	1.41176470588235E+000	1.76470588235299E-001

B(2,3) =

7.14285714285712E-001	1.71428571428571E+000	6.51654096299938E+000	-8.94427190999924E-001
1.23165366794353E-016	-6.38876564999941E-001	2.28571428571428E+000	1.28571428571428E+000

B(2,4) =

7.14285714285712E-001	1.71428571428571E+000	5.24034583685046E+000	3.97543477278310E+000
-4.51753951452626E-001	-4.51753951452626E-001	2.28571428571429E+000	1.28571428571429E+000

B(3,4) =

-1.00000000000001E+000	1.33333333333333E+000	3.57770876399965E+000	-4.17399355799961E+000
4.44089209850063E-016	-1.49071198499987E+000	4.00000000000000E+000	1.66666666666667E+000

II. ITERATIONS SIMULTANÉES

II.1 ITERATION DE SOUS-ESPACE : RAPPELS

Soit A une matrice $n \times n$ de spectre tel que :

$$|\mu_1| \gg \dots \gg |\mu_r| > |\mu_{r+1}| \gg \dots \gg |\mu_n| \quad (H)$$

et $\{x_1, \dots, x_n\}$ la base de Jordan associée à $\{\mu_1, \dots, \mu_n\}$
 et $\{x_{1^*}, \dots, x_{n^*}\}$ la base adjointe, i.e. $x_{i^*}^* x_j = \delta_{ij}$

Soit les sous-espaces $M = \text{lin}(x_1, \dots, x_r)$ et $M_x^* = \text{lin}(x_{1^*}, \dots, x_{r^*})$
 de bases respectives X et X_x^* .

Soit $P = X X_x^{*\perp}$ la projection spectrale (dominante) associée à A sur M le long
 de $M_x^{*\perp}$.

On désigne par S le sous-espace engendré par r vecteurs linéaire-
 ment indépendants formant la matrice $U = [u_1, \dots, u_r]$.

On a le théorème fondamental suivant :

Théorème

⌊ Sous l'hypothèse (H), la suite $A^k S$ converge vers M lorsque k tend
 vers $+\infty$ si et seulement si $\dim PS = r$

Preuve

Voir [3] ; il y est également montré que la condition $\dim PS = r$
 équivalente à $X_x^{*\perp} U$ régulière, est satisfaite lorsque A est une matrice de
 Hessenberg supérieure (i.e. $a_{ij} = 0$ pour $i > j + 1$) irréductible (i.e.
 $a_{ii-1} \neq 0$ pour $i = 2, \dots, n$) et $U = [e_1, \dots, e_r]$ où e_i désigne le $i^{\text{ième}}$
 vecteur de la base canonique de C^n .

Sous l'hypothèse (H), $A^k S$ converge vers M comme $\left| \frac{\mu_{r+1}}{\mu_r} \right|$

II. CAS DE VALEURS PROPRES DISTINCTES DE MEME MODULE

On considère la version simple suivante des itérations simultanées :

1. $U = [u_1, \dots, u_r]$, $U = Q_0 R_0$ (orthogonalisation de Schmidt)
2. Pour $k \geq 1$ faire

$$U_k = \Lambda Q_{k-1} = Q_k R_k$$

C'est la généralisation de la méthode de la puissance à r vecteurs linéairement indépendants.

Faisons à présent les hypothèses de la partie I, c'est-à-dire

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\mu_3| \geq \dots \geq |\mu_n|, \lambda_2 = e^{2i\frac{\pi}{p}} \lambda_1, p \text{ entier}$$

et itérons, en orthonormalisant à chaque pas, sur $U = [u_1, u_2]$ avec

$$u_1 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i \quad \text{et} \quad u_2 = \sum_{i=1}^n \beta_i \phi_i$$

on a :

$$\Lambda^k U = [\Lambda^k u_1 \quad \Lambda^k u_2]$$

Si α_1 et β_1 sont non nuls, d'après I, les suites $\Lambda^k u_1$ et $\Lambda^k u_2$ décrivent chacune pour k assez grand, un cycle de longueur p .

Donc $\Lambda^k U$, pour k assez grand, décrit un cycle de longueur p .

On a :

Proposition

Soit $[v_j, w_j]$, $j = 1, 2, \dots, p$ les éléments du cycle-limite de $\Lambda^k U$

Alors les matrices

$$M_j = \begin{pmatrix} * & * \\ v_j & \Lambda v_j & v_j & \Lambda w_j \\ * & * \\ w_j & \Lambda v_j & w_j & \Lambda w_j \end{pmatrix} \quad j = 1, 2, \dots, p$$

ont pour valeurs propres λ_1 et λ_2

Preuve

On remarque que $[v_j, w_j]$, pour tout j , ($1 \leq j \leq p$), est une base orthonormée de $\text{lin}(\phi_1, \phi_2)$ puis v_j et w_j appartiennent à $\text{lin}(\phi_1, \phi_2)$ et qu'on orthonormalise à chaque pas.

On fait alors le même raisonnement que dans la preuve de la proposition 2 de la partie I.

Remarques

1. Si ϕ_1 et ϕ_2 sont orthogonaux alors $M_1 = M_2 = \dots = M_p$

En effet on a :

$$v_j = e^{2i\pi \frac{j}{p}} \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2 \text{ et } w_j = e^{2i\pi \frac{j}{p}} \beta_1 \phi_1 + \beta_2 \phi_2$$

et en calculant les coefficients de M_j par développement, on constate effectivement que ceux-ci sont indépendants de j .

2. Si la condition $X_{*}^{*} U$ n'est pas satisfaite, on a une convergence vers un sous-espace qui n'est plus dominant. Voyons ceci sur un exemple.

$$\text{Soit } A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -2 & 3 & 2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \text{ on a : } \text{sp}(A) = \{3 ; 2 ; 1\}$$

$$\phi_1 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} , \phi_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ et } \phi_3 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$x_{1*} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} , x_{2*} \begin{bmatrix} +2 \\ -2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\text{En itérant sur } U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} , \text{ on obtient } \{1 ; 3\}$$

On a :

$$X_{*}^{*} U = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Remarquer que la méthode de la puissance appliquée à A à partir de $u \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ ne convergera pas vers le couple dominant (λ_1, ϕ_1) puisque $x_{1*}^{*} u = 0$; effectivement, on obtient (λ_3, ϕ_3) .

Il est alors nécessaire de réduire A sous forme d'une matrice de Hessenberg supérieure - toute matrice carrée est unitairement semblable à une matrice de Hessenberg supérieure - et d'itérer sur $[e_1, \dots, e_r]$. Si cette forme est réductible, le problème se décompose en sous-problèmes sur des Hessenberg irréductibles.

On s'intéresse maintenant à la forme limite de la matrice B_k telle que

$$B_k = Q_k^* A Q_k$$

Lorsqu'on itère sur $[e_1, \dots, e_r]$, on itère en même temps sur $[e_1, e_2]$ ce qui donne les matrices M_j de la proposition précédente. Ainsi, sous la condition $|\mu_r| > |\mu_{r+1}|$, on obtient, pour k assez grand, les formes bloc-triangulaires suivantes pour B_k :

$$F_j = \begin{matrix} M_j & \left\{ \begin{array}{|c|c|} \hline x & x \\ \hline x & x \\ \hline \end{array} \right. & \begin{array}{l} K_j \\ \mu_3 \\ \dots \\ \mu_r \end{array} \\ \hline & O & \end{matrix}, \quad j = 1, 2, \dots, p$$

L'itération génère p bases (orthonormées) limites pour $\text{lin}(\phi_1, \dots, \phi_r)$ à savoir :

$$(v_j, w_j, \eta_3, \dots, \eta_r), \quad j = 1, \dots, p$$

où

$$(v_j, w_j), \quad j = 1, \dots, p \text{ sont les } p \text{ bases-limites de } \text{lin}(\phi_1, \phi_2)$$

et les η_i , $i = 3, \dots, r$ sont fixes.

Remarques

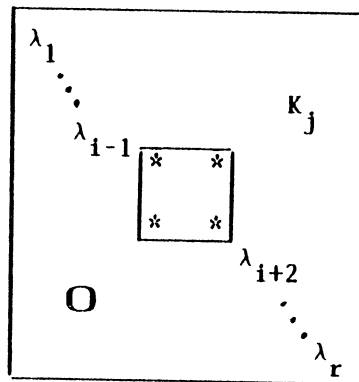
1. Malgré la génération de p bases-limites pour $\text{lin}(\phi_1, \dots, \phi_r)$, si A est normale - il en est de même de B_k - les limites F_j sont

bloc-diagonales, i.e. $K_j = 0, j = 1, 2, \dots, p$

2. Si $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_i| = |\lambda_{i+1}| > \dots > |\lambda_r| > |\lambda_{r+1}| \geq \dots \geq |\lambda_n|$

avec

$\lambda_i \neq \lambda_{i+1}$, alors F_j est de la forme



, $j = 1, 2, \dots, p$

Les valeurs propres du bloc 2×2 sont λ_i et λ_{i+1}

3. Cas où $|\lambda_r| = |\lambda_{r+1}|$

En général, on n'a plus la convergence vers le sous-espace dominant.

Exemple

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -3 & 2 & -1 \\ -1 & 4 & -4 & 2 \\ 2 & -1 & 4 & -3 \\ -3 & 2 & -1 & 4 \end{pmatrix}; \text{sp}(A) = \{10; 2 \pm 2i, 2\}$$

A est d'abord mise sous forme de Hessenberg et on itère sur $[e_1, e_2]$ i.e. $r = 2$. On obtient $\text{sp}(F) = \{10; 2\}$ où F limite de $B_k = Q_k^* A Q_k$

En pratique, on minimise un tel risque en itérant sur au moins $r + 1$ vecteurs lorsqu'on cherche les r éléments propres dominants.

4. Lorsque $r = n$, on obtient l'algorithme QR.

Citons dans le même ordre d'idée le :

Théorème (PARLETT)

L'algorithme QR appliqué à une matrice de Hessenberg irréductible produit une suite de matrices dont la forme limite est triangulaire si et seulement s'il n'existe pas deux valeurs propres distinctes de même module et dont les multiplicités algébriques aient même parité.

II.3 RESULTATS NUMERIQUES

Dans les exemples 1 et 2, on a $A = VDV^{-1}$ avec

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

On donne les bases-limites $[v_j, w_j]$ (resp. $[v_j, w_j, \eta_i]$) et les matrices M_j (resp. F_j) dans le cas $r = 2$ (resp. $r = 3$).

Exemple 1 $D = \text{diag}(3, -3, 2, 1)$

($p = 2$ dans les 2 cas)

Exemple 2 $D = \text{diag}(3, 2, -3, 1)$

Exemple 3

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -3 & 2 & -1 \\ -1 & 4 & -3 & 2 \\ 2 & -1 & 4 & -3 \\ -3 & 2 & -1 & 4 \end{pmatrix}; \quad \begin{array}{l} \lambda_1 = 10 ; \lambda_2 = \bar{\lambda}_3 = 2 + 2i ; \Rightarrow p = 4 \\ \lambda_4 = 2 \end{array}$$

A est une matrice normale

Dans les trois exemples, les matrices sont d'abord mises sous forme de Hessenberg supérieure et on itère sur $[e_1, \dots, e_i]$, $i = 2$ ou 3 .

EXEMPLE 1

NOMBRE DE VALEURS PROPRES DESIRE:R=2

BASE-LIMITE [v , w]
1 1

6.25543242171218E-001	-2.51477845384788E-001
1.98141920440778E-001	9.61303683848023E-001
7.24631177084013E-001	-1.33061237512255E-002
-2.10582736082042E-001	1.11700795751697E-001

M =
1

9.13043478260710E-001	-1.57310266736229E+000
-5.19123880229545E+000	-9.13043478260710E-001

BASE-LIMITE [v , w]
2 2

3.56034497458147E-001	-5.72525013571616E-001
-9.12448650289762E-001	-3.61666218771025E-001
1.38627581334238E-001	-7.11371765973927E-001
-1.46489900326048E-001	1.88050167800578E-001

M =
2

2.95774647887216E-001	-5.29980504271901E+000
-1.68166890778585E+000	-2.95774647887216E-001

Remarques ■ 2 bases-limites
■ $M_1 \neq M_2$

EXEMPLE 1 (SUITE)
 NOMBRE DE VALEURS PROPRES DESIRE:R=3

BASE-LIMITE $[v_1, w_1, \eta]$

6.25543242171218E-001	-2.51477845384788E-001	-4.95433694306862E-001
1.98141920440778E-001	9.61303683848023E-001	-2.85326350320552E-002
7.24631177084013E-001	-1.33061237512255E-002	1.89258405490594E-001
-2.10582736082042E-001	1.11700795751697E-001	-8.47297231929114E-001

F =
1

9.13043478260710E-001	-1.57310266736229E+000	-5.73917035958528E-001
-5.19123880229545E+000	-9.13043478260710E-001	-1.86539811968585E+000
6.66133814775094E-016	3.60822483003176E-016	2.00000000000000E+000

BASE-LIMITE $[v_2, w_2, \eta]$

3.56034497458147E-001	-5.72525013571616E-001	-4.95433694306862E-001
-9.12448650289762E-001	-3.61666218771025E-001	-2.85326350320551E-002
1.38627581334238E-001	-7.11371765973927E-001	1.89258405490594E-001
-1.46489900326048E-001	1.88050167800578E-001	-8.47297231929115E-001

F =
2

2.95774647887216E-001	-5.29980504271901E+000	1.73778279170807E+000
-1.68166890778585E+000	-2.95774647887216E-001	8.88370349535724E-001
-8.32667268468867E-017	2.22044604925031E-016	2.00000000000000E+000

REMARQUE : Reconnaître les matrices M_1 et M_2 dans F_1 et F_2 .

EXEMPLE 2

NOMBRE DE VALEURS PROPRES DESIRE:R=2

BASE-LIMITE [v , w]
1 1

8.00640769025438E-001	-1.60128153805074E-001
8.33876398450012E-002	9.58957858217693E-001
5.34870820443003E-001	-2.16672207355298E-002
-2.56776295506544E-001	-2.33000712589279E-001

M =
1

1.15384615384606E+000	2.76923076923081E+000
2.76923076923081E+000	-1.15384615384607E+000

BASE-LIMITE [v , w]
2 2

1.60128153805062E-001	8.00640769025440E-001
9.17264038295192E-001	-2.91856739457530E-001
1.85719034876027E-001	5.02060457614908E-001
-3.13837694507998E-001	-1.47408614087102E-001

M =
2

1.15384615384598E+000	2.76923076923084E+000
2.76923076923084E+000	-1.15384615384598E+000

Remarque - Les matrices M_1 et M_2 sont égales quoique construites à partir de deux bases-limites différentes .

En effet, ici ϕ_1 et ϕ_2 sont orthogonaux : voir les 1ère et 3ème colonnes de V.

EXEMPLE 2 (SUITE)
NOMBRE DE VALEURS PROPRES DESIRE:R=3

BASE-LIMITE [v_1, w_1, η_1]

8.00640769025438E-001	-1.60128153805074E-001	-1.82574185835055E-001
8.33876398450012E-002	9.58957858217693E-001	-2.61460478697841E-001
5.34870820443003E-001	-2.16672207355298E-002	-1.36227299836624E-001
-2.56776295506544E-001	-2.33000712589279E-001	-9.37948403444979E-001

F =
1

1.15384615384606E+000	2.76923076923081E+000	-1.40329283089126E+000
2.76923076923081E+000	-1.15384615384607E+000	9.64763821237710E-001
-2.77555756156289E-016	-5.55111512312578E-017	2.00000000000000E+000

BASE-LIMITE [v_2, w_2, η_2]

1.60128153805062E-001	8.00640769025440E-001	-1.82574185835055E-001
9.17264038295192E-001	-2.91856739457530E-001	-2.61460478697841E-001
1.85719034876027E-001	5.02060457614908E-001	-1.36227299836624E-001
-3.13837694507998E-001	-1.47408614087102E-001	-9.37948403444979E-001

F =
2

1.15384615384598E+000	2.76923076923084E+000	3.50823207722864E-001
2.76923076923084E+000	-1.15384615384598E+000	-1.66641023668335E+000
-4.44089209850063E-016	-2.22044604925031E-016	2.00000000000000E+000

EXEMPLE 3

NOMBRE DE VALEURS PROPRES DESIRE:R=3
 BASE-LIMITE [η , v , w]

1 1		
5.000000000000000E-001	6.85994340570035E-001	1.71498585142509E-001
8.01783725737273E-001	-4.58349248514106E-001	2.75009549108463E-001
3.23721237027294E-001	-8.88283746092187E-003	-9.46022189588213E-001
-4.84501583111509E-002	-5.65021084819921E-001	-3.21997830154550E-016
F =		
1		
1.000000000000000E+001	2.60902410786912E-015	-1.62034838093190E-015
2.28983498828939E-016	2.000000000000000E+000	-2.000000000000000E+000
-7.70217223333702E-016	2.000000000000000E+000	2.000000000000000E+000
BASE-LIMITE [η , v , w]		
2 2		
5.000000000000000E-001	-6.06339062590832E-001	3.63803437554500E-001
8.01783725737273E-001	1.29640744710433E-001	-5.18562978841732E-001
3.23721237027294E-001	6.75219820015567E-001	6.62657590805975E-001
-4.84501583111509E-002	3.99530240589545E-001	-3.99530240589545E-001
F =		
2		
1.000000000000000E+001	-6.66133814775094E-016	1.38777878078145E-015
5.55111512312578E-017	2.000000000000000E+000	-2.000000000000000E+000
-4.87121594893081E-016	2.000000000000000E+000	2.000000000000000E+000
BASE-LIMITE [η , v , w]		
3 3		
5.000000000000000E-001	-3.63803437554500E-001	-6.06339062590832E-001
8.01783725737273E-001	5.18562978841731E-001	1.29640744710433E-001
3.23721237027294E-001	-6.62657590805975E-001	6.75219820015567E-001
-4.84501583111509E-002	3.99530240589545E-001	3.99530240589545E-001
F =		
3		
1.000000000000000E+001	-9.43689570931383E-016	-5.27355936696949E-016
-5.72318211587421E-017	2.000000000000000E+000	-2.000000000000000E+000
2.77555756156289E-016	2.000000000000000E+000	2.000000000000000E+000
BASE-LIMITE [η , v , w]		
4 4		
5.000000000000000E-001	1.71498585142509E-001	-6.85994340570035E-001
8.01783725737273E-001	2.75009549108463E-001	4.58349248514106E-001
3.23721237027294E-001	-9.46022189588213E-001	8.88283746092237E-003
-4.84501583111509E-002	2.43427930196394E-017	5.65021084819920E-001
F =		
4		
1.000000000000000E+001	-8.99972541455496E-016	-1.72084568816899E-015
1.87350135405495E-016	2.000000000000000E+000	-2.000000000000000E+000
5.48172618408671E-016	2.000000000000000E+000	2.000000000000000E+000

Remarque - On a 4 bases-limites pour $\text{lin}(\phi_1, \phi_2, \phi_3)$ mais $F_1 = F_2 = F_3 = F_4$;
 la forme bloc-diagonale provient du fait que A est normale.



DEUXIEME PARTIE

ACCÉLÉRATION DE TCHEBYCHEFF

ET

ALGORITHME DE LANCZOS



I. ACCELERATION DE TCHEBYCHEFF

I.1 PRINCIPE DE LA METHODE

Considérons tout d'abord l'itération polynômiale sur un vecteur u_0 : $u_k = p_k(A)u_0$ où $p_k \in \mathbb{P}_k$, ensemble des polynômes de degré $\leq k$.

Si $|\lambda_1| > |\mu_2| \geq \dots \geq |\mu_n|$, il s'agit de trouver p_k tel que la suite u_k converge rapidement vers ϕ_1 , vecteur propre associé à λ_1 .

Supposons A diagonalisable et soit $\{\phi_i\}_{i=1}^n$ une base de vecteurs propres

si
$$u_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i$$

alors

$$u_k = \alpha_1 p_k(\lambda_1)\phi_1 + \sum_{i=2}^n \alpha_i p_k(\mu_i)\phi_i$$

u_k est donc une bonne approximation de ϕ_1 si $|p_k(\mu_j)|$, $j \geq 2$ est petit par rapport à $|p_k(\lambda_1)|$;

D'où la résolution du problème :

$$\min_{p \in \mathbb{P}_k} \max_{\lambda \in E} |p(\lambda)| \quad \text{où } E = \{\lambda_2, \dots, \lambda_n\}$$

$$p(\lambda_1) = 1$$

En pratique, on utilise des techniques d'itérations pour résoudre ce problème et E, plutôt que d'être un ensemble discret, est une ellipse contenant $\text{sp}(A) - \{\lambda_1\}$, ayant son centre sur l'axe réel et son demi-grand axe réel.

Soit $E(c, e, a)$ cette ellipse de centre c, de distance focale e et de demi-grand axe a. On démontre [6] que, dans le cas d'un spectre réel,

l'optimum du problème ci-dessus est \tilde{p}_k tel que :

$$p_k(z) = \frac{T_k\left(\frac{z-c}{e}\right)}{T_k\left(\frac{\lambda_1-c}{e}\right)}$$

où T_k est le polynôme de Tchebycheff de 1ère espèce de degré k . Ce polynôme est, rappelons-le, défini par :

$$\begin{aligned} T_k(x) &= \cos(k \operatorname{Arcos} x), & |x| \leq 1 \\ &= \operatorname{ch}(k \operatorname{Argch} x) & |x| > 1 \end{aligned}$$

et vérifie la récurrence à 3 termes :

$$T_0(x) = 1 ; T_1(x) = x ; T_k(x) = 2x T_{k-1}(x) - T_{k-2}(x), \quad k = 2, 3, \dots$$

En posant

$$\rho_k = T_k\left(\frac{\lambda_1 - e}{e}\right) \quad \text{et} \quad \sigma_{k+1} = \frac{\rho_k}{\rho_{k+1}}, \quad k = 0, 1, \dots$$

On obtient

$$\tilde{p}_{k+1}(z) = 2 \sigma_{k+1} \frac{z-c}{e} \tilde{p}_k(z) - \sigma_k \sigma_{k+1} \tilde{p}_{k-1}(z)$$

et les σ_k vérifient

$$\sigma_1 = \frac{e}{\lambda_1 - c}, \quad \sigma_{k+1} = \frac{1}{\frac{2}{\sigma_1} - \sigma_k}, \quad k = 1, 2, \dots$$

On définit l'itération de Tchebycheff par :

1. $u_0 \neq 0, \sigma_1 = \frac{e}{\lambda_1 - c}, u_1 = \frac{\sigma_1}{e} (A - cI)u_0$
2. pour $j = 1, 2, \dots, k-1$ faire

$$\sigma_{j+1} = \frac{1}{\frac{2}{\sigma_1} - \sigma_j}$$

$$u_{j+1} = \frac{2 \sigma_{j+1}}{e} (A - cI)u_j - \sigma_j \sigma_{j+1} u_{j-1}$$

Cette itération se généralise bien pour le calcul de r valeurs propres de plus grande partie réelle ($1 \leq r \leq n$). En d'autres termes, par introduction du polynôme de Tchebycheff, les itérations simultanées, version simplifiée - que nous noterons dans toute la suite I.S.S. -

$$\left. \begin{array}{l} 1. \quad U = Q_0 R_0 \\ 2. \quad U_k = A Q_{k-1} = Q_k R_k, \quad k \geq 1 \end{array} \right\}$$

vues au chapitre 1 deviennent :

$$\left. \begin{array}{l} 1. \quad U = Q_0 R_0, \quad \sigma_1 = \frac{e}{\lambda_1 - c} = \quad U_1 = \frac{\sigma_1}{e} (A - cI) Q_0 \\ 2. \quad \text{pour } j = 1, 2, \dots, k-1 \quad \text{faire} \\ \quad \sigma_{j+1} = \frac{1}{\frac{2}{\sigma_1} - \sigma_j} \\ \quad U_{j+1} = \frac{2 \sigma_{j+1}}{e} (A - cI) U_j - \sigma_j \sigma_{j+1} U_{j-1} \\ 3. \quad U_k = Q_k R_k \end{array} \right\}$$

Ce sont les itérations simultanées de Tchebycheff notées dans toute la suite I.S.T.: c'est une méthode de projection sur le sous-espace $S_k = T_k(A)S$ où $S = \text{lin } U$.

Remarques

1. Quoique λ_1 ne soit pas connue, on remarque qu'elle n'intervient qu'au dénominateur de σ_k , qui est un facteur de normalisation ; en pratique, λ_1 peut donc être remplacée par une approximation.
2. Toute la difficulté de la mise en pratique de cette itération réside dans la détermination des paramètres optimaux c, e, a de $E(c, e, a)$.

En notant Π_k la projection orthogonale sur S_k et P la projection spectrale associée à $\left\{ \mu_i \right\}_{i=1}^r$, on a les théorèmes suivants dont on trouvera les preuves dans [3] :

Théorème 1

Si $\dim PS = r$ et si les valeurs propres $\left\{ \mu_i \right\}_{i=1}^n$ sont réelles, on a :

$$\| (I - \Pi_k) \phi_i \|_2 \leq c_i \frac{1}{T_k(\gamma_i)}$$

où

$$\gamma_i = 1 + 2 \frac{\mu_i - \mu_{r+1}}{\mu_{r+1} - \mu_n}, \quad i = 1, \dots, r$$

Théorème 2

Si $\dim PS = r$, la méthode d'itérations de Tchebycheff simultanées avec paramètres optimaux converge.

- (i) Si la $i^{\text{ième}}$ valeur propre de plus grande partie réelle est simple et si les μ_j , $j = r+1, \dots, n$ sont dans l'ellipse $E(c, e, a)$, le taux de convergence de la $i^{\text{ième}}$ paire d'éléments propres est de l'ordre de

$$\frac{T_k\left(\frac{a}{2}\right)}{T_k\left(\frac{\mu_i - c}{e}\right)}$$

- (ii) Si A est hermitienne, le taux de convergence pour la $i^{\text{ième}}$ plus grande valeur propre devient

$$\frac{1}{T_k^2(\gamma_i)}$$

I.2 CAS D'UNE MATRICE SYMETRIQUE DEFINIE POSITIVE

Ici, A et $sp(A)$ étant réels, beaucoup de simplifications apparaissent ; l'ellipse E se réduit à un segment porté par le demi-axe réel positif ($e = a$).

I.2.a Détermination dynamique d'une approximation de λ_1 et des paramètres optimaux c et a de $E(c, a, a)$

Le fait suivant est essentiel pour cette détermination :

Considérons l'itération (I.S.S.). Puisque A est symétrique définie positive,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} Q_k = Q \quad \text{et} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} R_k = D \quad \text{où } D \text{ est une}$$

matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont des valeurs propres de A : ce sont les r valeurs propres dominantes de A sous les conditions du théorème fondamental du II du chapitre 1 ; les colonnes de Q en sont les vecteurs propres normalisés associés.

Détermination dynamique d'une approximation de λ_1

On procédera de la façon suivante :

- Faire m pas de (I.S.S.)

- Initialiser λ_1 à
$$R_{11}^{(m)} = \sum_{i=1}^n Q_{i1}^{(m)} U_{i1}^{(m)}$$

avec

$$R^{(m)} = Q^{(m)} H^{(m)} U^{(m)}$$

Remarques

1. En prenant $m = 1$, $R_{11}^{(1)}$ peut être loin de λ_1 ; mais il y a amélioration au cours des itérations. (1)

2. La convergence étant quadratique, une bonne approximation de λ_1 s'obtient "rapidement".

Détermination dynamique du milieu c du segment E

Le segment E doit contenir $\left\{ \mu_i \right\}_{i=r+1}^n$ et aucun μ_i , $1 \leq i \leq r$

Son milieu c doit donc vérifier $\mu_{r+1} \leq 2c < \mu_r$.

Ainsi, pour la recherche des r valeurs propres dominantes, on commence par itérer sur r+1 vecteurs. Au moment de l'initialisation de λ_1 , l'élément (r+1, r+1) de $R^{(m)}$, c'est-à-dire

$$R_{r+1,r+1}^{(m)} = \sum_{i=1}^n Q_{i,r+1}^{(m)} U_{i,r+1}^{(m)}$$

est considéré comme une approximation de μ_{r+1} et on initialise c à

$$\frac{R_{r+1,r+1}}{2}$$

Remarque

Dès que c cesse de varier, c'est qu'on a atteint sa valeur optimale et on décrémente r de 1.

Détermination dynamique de a

Puisque les valeurs propres sont réelles positives, on peut prendre $c = a$.

Introduisons pour la suite la notion de "proche de la convergence" pour un vecteur.

Puisque les colonnes de Q_k convergent vers les vecteurs propres normalisés correspondant aux valeurs propres dominantes, nous dirons qu'à la $k^{\text{ième}}$ étape, le $i^{\text{ième}}$ vecteur propre ($1 \leq i \leq r$) est proche de la convergence si

$$\left| \left| \langle Q_{.i}^{(k-1)}, Q_{.i}^{(k)} \rangle - 1 \right| \leq \varepsilon \right.$$

où

ε est un réel positif petit.

Nous verrons les avantages et désavantages de la mise en pratique de cette notion.

I.2.b Sur le degré du polynôme de Tchebycheff

Il est nécessaire de prendre des précautions pour le degré k du polynôme de Tchebycheff pour les raisons suivantes :

1. Un degré k très grand peut :
 - entraîner la dépendance des colonnes de U_k (perte d'orthonormalité) ; en effet les itérations simultanées n'étant que la généralisation de la méthode de la puissance,
 - rendre plus long le temps d'exécution.
2. En choisissant k très petit on risque de ne pas assez accélérer la convergence.

En voici deux exemples :

Exemple 1

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, \quad i, j = 1, \dots, 50 \quad (\text{Matrice de Hilbert})$$

Exemple 2

$$A(12 \times 12) =$$

21·54	27·62	35·67	41·42	48·36	55·32	4·43	11·27	18·42	25·43	32·38	39·32
	73·68	103·40	132·90	161·00	194·80	10·82	36·50	67·23	98·25	129·00	159·70
		192·40	265·90	342·30	419·10	17·30	65·22	136·10	212·80	289·40	365·90
			428·30	576·00	722·20	23·71	94·30	210·90	355·10	504·30	653·10
				843·60	1,090·30	30·05	122·90	285·10	501·90	747·70	977·30
					1,510·60	36·42	151·60	359·30	649·30	996·90	1,373·00
						10·81	17·21	23·53	29·88	36·25	42·61
							49·90	78·73	107·40	136·10	164·90
								157·70	232·10	306·20	380·40
									383·80	530·60	677·50
										788·10	1,036·90
											1,424·70

Pour chaque exemple, on a pris $r = 5$.

Nous donnons le temps qu'il a fallu pour obtenir les 5 valeurs propres dominantes ainsi que les vecteurs propres associés pour différentes valeurs du degré k du polynôme de Tchebycheff ; le critère de convergence de la $i^{\text{ième}}$ paire d'éléments propres (μ_i, ϕ_i) est que la norme résiduelle $\|\Lambda\phi_i - \mu_i\phi_i\|_2$ soit inférieure à 10^{-5} .

k	1	2	3	4	5	
Temps d'exécution	26.92	32.94	39.06	45.20	51.14	Exemple 1
(en s)	19.32	16.50	24.96	25.52	46.96	Exemple 2

Remarques

1. Le degré optimal est 1 dans l'exemple 1 et 2 dans l'exemple 2.
2. Les calculs ont été faits sur un micro-ordinateur (MICRAL 9050).

La détermination du degré optimal n'est pas chose aisée. Il existe cependant beaucoup de propositions relatives au choix du degré du polynôme de Tchebycheff [9, 19]. Nous avons choisi k comme indiqué dans [19], plus précisément tel que

$$k-1 \leq \frac{\text{Argch}(10)}{\text{Argch}\left(\frac{\lambda_1 - e}{c}\right)}$$

mais ceci est une borne supérieure ayant pour but d'éviter que les colonnes de U_k ne deviennent dépendantes, et peut être très grande ; une façon de procéder est de fixer un degré maximum satisfaisant l'inégalité ci-dessus et qu'on diminuera à l'approche de la convergence.

I.2.c Itérations simultanées avec projection

L'étape 2 de l'itération (I.S.T.) peut s'écrire $U_k = p_k(A)Q_0$ où p_k est le polynôme de Tchebycheff de degré k .

Après l'orthonormalisation de l'étape 3, c'est-à-dire $U_k = Q_k R_k$, on forme la matrice $B_k = Q_k^* A Q_k$ que l'on diagonalise. Soit F_k la matrice des vecteurs propres de B_k ; on retourne à 2 avec $Q_0 = Q_k F_k$.

L'avantage de la projection est que les colonnes de $Q_k F_k$ approchent mieux les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres dominantes de A que celles de Q_k ; mais, elle doit se faire de temps en temps seulement car ce calcul rallonge le temps de calcul global. Ainsi à la $k^{\text{ième}}$ itération, nous déciderons de la nécessité de la projection après l'estimation de l'approche de la convergence.

Pour la diagonalisation, nous avons utilisé :

- l'algorithme QR pour le calcul des r valeurs propres de B_k ,
- les itérations inverse et inverses simultanées pour le calcul des vecteurs propres.

Les itérations inverses simultanées sont définies par :

1. $U = Q_0 R_0$

2. pour $k \geq 0$ faire

$$(A - \sigma I)Y_{k+1} = Q_k$$

$$Y_{k+1} = Q_{k+1} R_{k+1}$$

Elles nécessitent, à chaque pas d'itération, la résolution de m systèmes linéaires d'ordre n : les matrices U , Q et Y sont d'ordre $n \times m$ où m est la multiplicité algébrique de la valeur propre dont σ est une approximation.

I;2.d Le critère d'arrêt

La paire d'éléments propres (μ_i, ϕ_i) est estimée satisfaisante lorsque la norme résiduelle $r_i = \|A\phi_i - \mu_i\phi_i\|$ est inférieure à un certain ϵ généralement laissé au choix de l'utilisateur. Mais remarquons que si ϵ est très petit, la condition $r_i < \epsilon$ peut ne jamais être vérifiée, c'est-à-dire que r_i peut stagner à partir d'un certain rang en restant supérieure à ϵ . Le programme doit alors être capable de déceler une telle situation.

Le critère d'arrêt nécessite le calcul de la quantité r_i . Evaluons ce coût en nombre d'opérations élémentaires (+, x, -). La matrice A est d'abord mise sous forme de Hessenberg supérieure. Comme elle est symétrique, cette forme est tridiagonale ; donc r_i coûtera :

- $7n$ opérations élémentaires pour la formation de $u_i = A\phi_i - \mu_i\phi_i$
- $2n-1$ opérations élémentaires pour le calcul de $u_i^*u_i$
- une extraction de racine carrée

et n est grand !

Il paraît donc raisonnable de ne faire le test $r_i < \epsilon$ que lorsque cette inégalité est susceptible d'être vérifiée. Là encore, on pourra d'abord estimer l'approche de la convergence de ϕ_i . Cette estimation coûte $2n-1$ opérations élémentaires.

A la lumière de ceci, les avantages et désavantages de l'estimation du "degré" de convergence d'un vecteur deviennent évidents :

Avantages

- Permettre la diminution du degré du polynôme de Tchebycheff

- Contrôler la fréquence de la projection
- Eviter les calculs inutiles pour le test d'arrêt

Désavantages

- Le calcul de deux produits scalaires à chaque pas d'itération
- Le stockage en mémoire d'un vecteur, celui dont les coordonnées sont $(Q_{ji}^{(k-1)})_{j=1}^n$.
- L'introduction de deux tests supplémentaires à chaque pas d'itération.

I.2.e Résultats numériques (calculs faits sur le MICRAL 9050)

$$A = (a_{ij}) \quad \text{avec} \quad a_{ij} = \frac{1}{i + j - 1}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n$$

Nous avons utilisé différentes valeurs de n : 40 ; 50 ; 60 ; 70.
Les méthodes (I) et (II) désignent respectivement les itérations (I.S.S.) et (I.S.T.), toutes deux avec projection.

Avec chacune de ces méthodes et pour chaque valeur de n , on calcule les 5 éléments propres dominants ($r = 5$).

Le critère de convergence du couple propre (μ_i, ϕ_i) est $r_i \leq 10^{-5}$
avec $r_i = \| A\phi_i - \mu_i\phi_i \|_2$.

Le test de convergence se fait vecteur par vecteur.

Dans le tableau 1, on donne les 5 valeurs propres dominantes calculées par les deux méthodes.

Dans le tableau 2, on donne, pour chaque méthode et pour chaque valeur de n , les temps minimum et maximum (de convergence) ainsi que les normes résiduelles minimum et maximum.

Les nombres écrits entre parenthèses désignent les couples propres réalisant les temps et normes résiduelles indiqués.

Exemple

Avec la méthode I, et pour $n = 40$, le temps minimum de convergence (temps nécessaire pour obtenir la première convergence) est de 12.94 secondes et est réalisé par les couples propres (μ_4, ϕ_4) et (μ_5, ϕ_5) tandis que le temps maximum de convergence est de 16.80 secondes, réalisé par le couple propre (μ_2, ϕ_2) .

Les normes résiduelles minimum et maximum sont respectivement 1.8×10^{-8} et 6.5×10^{-6} réalisées respectivement par les couples (μ_5, ϕ_5) et (μ_3, ϕ_3) .

LES 5 VALEURS PROPRES DOMINANTES
CALCULEES PAR LES 2 METHODES

N	Méthodes	
	I	II
40	2.03836683529765 6.33099074045860 x 10 ⁻¹ 1.29660013435606 x 10 ⁻¹ 2.15357727493833 x 10 ⁻² 3.09919014228137 x 10 ⁻³	2.03836683525838 6.33099074086200 x 10 ⁻¹ 1.29660013353337 x 10 ⁻¹ 2.15357727490053 x 10 ⁻² 3.099190100230052 x 10 ⁻³
50	2.07629668306777 6.79693753017500 x 10 ⁻¹ 1.49684309052094 x 10 ⁻¹ 2.70926593784808 x 10 ⁻² 4.30265726865670 x 10 ⁻³	2.07629668310741 6.79693752973479 x 10 ⁻¹ 1.49684308952836 x 10 ⁻¹ 2.70926593779918 x 10 ⁻² 4.30265714649449 x 10 ⁻³
60	2.10589183596023 7.17465184387720 x 10 ⁻¹ 1.66879342478289 x 10 ⁻¹ 3.22042958124500 x 10 ⁻² 5.50128910217441 x 10 ⁻³	2.10589183592769 7.17465184393849 x 10 ⁻¹ 1.66879342482888 x 10 ⁻¹ 3.22042958123315 x 10 ⁻² 5.50128883688157 x 10 ⁻³
70	2.12998751086222 7.49150767542313 x 10 ⁻¹ 1.81961738229520 x 10 ⁻¹ 3.69309219755292 x 10 ⁻² 6.67886789960788 x 10 ⁻³	2.12998751090658 7.49150767498690 x 10 ⁻¹ 1.81961738276230 x 10 ⁻¹ 3.69309219754801 x 10 ⁻² 6.67886790614929 x 10 ⁻³

TABLEAU 2

n		40		50		60		70		
Temps (en s)		min.	12.94 (4,5)	9.80 (5)	14.66 (4,5)	11.52 (5)	16.22 (4)	13.26 (5)	17.82 (4,5)	19.04 (3,4,5)
		max.	16.80 (2)	12.20 (1,2)	19.46 (2)	14.48 (2)	24.88 (1,2)	16.76 (3,4)	27.90 (2)	23.42 (1,2)
Normes résiduelles		min.	1.8×10^{-8} (5)	8.4×10^{10} (4)	5.1×10^{-8} (5)	2.10^{-8} (4)	1.1×10^{-7} (5)	1.5×10^{-8} (4)	1.8×10^{-7} (4)	5.1×10^{-9} (5)
		max.	6.5×10^{-6} (3)	8.9×10^{-6} (2)	9.5×10^{-6} (2)	6.1×10^{-6} (2)	5.2×10^{-6} (1)	8.5×10^{-6} (2)	7.8×10^{-6} (2)	5.5×10^{-6} (3)
Méthodes		I	II	I	II	I	II	I	II	

Remarques

- La méthode II fournit à la fois les plus petits temps d'exécution et les plus petites normes résiduelles.

- pour $n = 70$, la première convergence a lieu avec la méthode I ; cela peut provenir du fait suivant : la performance de la méthode II n'est atteinte que si les paramètres optimaux sont utilisés ; la lenteur de l'obtention de ceux-ci peut allonger les premières convergences.

II. ALGORITHME DE LANCZOS

Soit A une matrice hermitienne $n \times n$ et u un vecteur non nul.
Soit $K_n = \text{lin}(u, Au, \dots, A^{n-1}u)$; on suppose que $\dim K_n = n$, c'est-à-dire que $p(A)u \neq 0$ pour tout $p \in \mathbb{P}_{n-1}$.

L'algorithme de Lanczos est une méthode de projection sur le sous-espace K_n . Plus précisément, c'est, en théorie, une méthode constructive d'une base orthonormée $V_n = [v_1, \dots, v_n]$ de K_n dans laquelle la restriction de A à K_n est représentée par une matrice tridiagonale $T_n = V_n^* A V_n$.

La mise en pratique de cet algorithme voit apparaître la perte de certaines propriétés théoriques, essentiellement l'orthogonalité globale des vecteurs v_1, \dots, v_n - appelés vecteurs de Lanczos -. Nous examinons cette situation.

II.1 ALGORITHME DE LANCZOS

Il est défini par :

$$1. \quad u \neq 0, \quad v_1 = \frac{u}{\|u\|}, \quad \alpha_1 = v_1^* A v_1, \quad \beta_1 = 0$$

2. pour $j = 1, 2, \dots, n-1$ faire

$$w_{j+1} = A v_j - \alpha_j v_j - \beta_j v_{j-1} \quad (v_0 = 0)$$

$$\beta_{j+1} = \|w_{j+1}\|$$

$$v_{j+1} = \frac{w_{j+1}}{\beta_{j+1}} \quad (\text{si } \beta_{j+1} > 0)$$

$$\alpha_{j+1} = v_{j+1}^* A v_{j+1}$$

Théorème

Soit P_i la projection propre associée à λ_i
 et x_i un vecteur propre associé à λ_i

Si $P_i u \neq 0$ alors $\text{tg}\theta(x_i, K_\ell) \leq \frac{\Delta_i}{T_{\ell-i}(\gamma_i)} \text{tg}\theta(x_i, u)$

où

$$\Delta_1 = 1, \quad \Delta_i = \prod_{j < i} \frac{\lambda_j - \lambda_{\min}}{\lambda_j - \lambda_i}, \quad i > 1$$

$$\gamma_i = 1 + 2 \frac{\lambda_i - \lambda_{i+1}}{\lambda_{i+1} - \lambda_{\min}}$$

et $T_{\ell-i}$ est le polynôme de Tchebycheff de degré $\ell-i$

Théorème

Soit Π_ℓ la projection orthogonale sur K_ℓ .

Etant donné λ, x , il existe pour $\alpha_\ell (= \|(I - \Pi_\ell)x\|_2)$

assez petit, λ_ℓ et x_ℓ éléments propres de la restriction de A à K_ℓ tels que $|\lambda - \lambda_\ell| \leq c\alpha_\ell^2$ et $\sin \theta_\ell \leq c\alpha_\ell$, où c est une constante générique et où θ_ℓ est l'angle aigu formé par les directions propres $\text{lin}(x_\ell)$ et $\text{lin}(x)$.

cf [3].

Regardons maintenant l'aspect pratique de l'algorithme de Lanczos.

Soit T_j la matrice tridiagonale de l'étape j , (θ_i, s_i) , $i = 1, \dots, j$ ses éléments propres : $T_j s_i = \theta_i s_i$, $\|s_i\| = 1$, $i = 1, \dots, j$. On obtient une approximation des vecteurs propres normalisés de A correspondant aux θ_i par

$$y_i = V_i s_i, \quad i = 1, \dots, j.$$

Les θ_i et y_i sont respectivement appelés valeurs et vecteurs de Ritz de A .

II.2 LA PERTE D'ORTHOGONALITE GLOBALE DES VECTEURS DE LANCZOS

Comme il a déjà été remarqué, les vecteurs de Lanczos sont construits par orthogonalité locale. Au cours des itérations, ces vecteurs perdent la propriété d'orthogonalité globale.

Voyons un exemple. Soit $A = M D M^{-1}$

avec

$$M = I - 2 \frac{u u^t}{\|u\|^2}, \quad u = \frac{e}{\|e\|}, \quad e^t(1, \dots, 1), \quad n = 8$$

$$D = \text{diag}(10 ; 1 ; 0.2 ; 3 \cdot 10^{-4} ; 4 \cdot 10^{-5} ; 5 \cdot 10^{-6} ; 6 \cdot 10^{-7} ; 7 \cdot 10^{-8})$$

on a

$$V_8^H V_8 =$$

1	0	0	0	$-8.2 \cdot 10^{-10}$	$-2.4 \cdot 10^{-4}$	$-3.5 \cdot 10^{-1}$	$3.3 \cdot 10^{-2}$
	1	0	0	$-2.1 \cdot 10^{-9}$	$-6.3 \cdot 10^{-4}$	$-9.3 \cdot 10^{-1}$	$-4.7 \cdot 10^{-3}$
		1	0	$-1.9 \cdot 10^{-10}$	$-6.2 \cdot 10^{-5}$	$-9.2 \cdot 10^{-2}$	$-8.6 \cdot 10^{-2}$
			1	$2.7 \cdot 10^{-13}$	$1.0 \cdot 10^{-6}$	$-1.6 \cdot 10^{-3}$	$-1.9 \cdot 10^{-2}$
				1	0	$-5.3 \cdot 10^{-8}$	$-7.0 \cdot 10^{-6}$
					1	0	$-2.8 \cdot 10^{-10}$
Symétrique						1	$4.4 \cdot 10^{-13}$
							1

Les valeurs propres de T_8 sont :

$$\mu_1 = \mu_2 = 10 ; \quad \lambda_3 = 1 ; \quad \lambda_4 = 0.2$$

$$\lambda_5 = 9.06 \cdot 10^{-3} ; \quad \lambda_6 = 2.99999 \cdot 10^{-4}$$

$$\lambda_7 = 3.95 \cdot 10^{-5} ; \quad \lambda_8 = 1.6 \cdot 10^{-6}$$

Remarques

1. La perte d'orthogonalité globale a entraîné l'apparition d'une seconde copie de la valeur propre 10.

2. Il faut aller jusqu'à 12 itérations pour avoir toutes les valeurs propres de A à au moins 10^{-7} près et la matrice T_{12} admet les valeurs propres multiples suivantes :

$$\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = 10 ; \mu_4 = \mu_5 = 1 ; \mu_6 = \mu_7 = 0.2$$

Conséquences pratiques

- Il faut plus de n itérations pour obtenir toutes les valeurs propres de A. Il se pose donc le problème de savoir lesquelles des valeurs propres de T sont valeurs propres de A. On pourra admettre toute valeur propre multiple de T mais au bout de m itérations ($m > n$) certains éléments de $sp(T_m)$ qui sont aussi éléments de $sp(A)$ peuvent ne pas être encore "dupliqués".

Le test d'arrêt devient alors un sérieux problème surtout lorsqu'on cherche seulement quelques valeurs propres de A.

- Certains y_i calculés par $y_i = V_j s_i$, $i = 1, \dots, j$ ne vérifieront plus $\|y_i\| = 1$ puisque $V_j^H V_j \neq I_j$. Aussi, le calcul des vecteurs propres devra-t-il se faire par une autre méthode.

Pour l'exemple ci-dessus, on a :

$$Y_8^H Y_8 =$$

1	-1	$5.9 \cdot 10^{-6}$	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$-4.2 \cdot 10^{-12}$	$-7.3 \cdot 10^{-10}$	$1.2 \cdot 10^{-10}$	$-4.2 \cdot 10^{-10}$
	1	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$-1.2 \cdot 10^{-6}$	$-6.8 \cdot 10^{-8}$	$7.4 \cdot 10^{-10}$	$-1.5 \cdot 10^{-10}$	$4.5 \cdot 10^{-10}$
		1	$-3.4 \cdot 10^{-5}$	$-9.5 \cdot 10^{-2}$	$1.6 \cdot 10^{-5}$	$-3.8 \cdot 10^{-5}$	$2.7 \cdot 10^{-5}$
			1	$-9.5 \cdot 10^{-5}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$-1.02 \cdot 10^{-5}$	$-5.6 \cdot 10^{-5}$
				1	$-5.06 \cdot 10^{-10}$	$-2.6 \cdot 10^{-10}$	$3.4 \cdot 10^{-10}$
					1	$-5.2 \cdot 10^{-5}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$
						1	$4.9 \cdot 10^{-5}$
							1

Symétrique

II.3 COMMENT MAINTENIR L'ORTHOGONALITE GLOBALE DES VECTEURS DE LANCZOS

On peut utiliser :

a. Une réorthogonalisation totale

Il s'agit d'appliquer la méthode d'orthogonalisation de Schmidt à $[v_1, \dots, v_j]$. Ceci nécessite :

- le stockage en mémoire de tous les vecteurs de Lanczos
- un calcul coûteux.

b. Une stratégie de réorthogonalisation

Soit à l'étape j : $S_j = [s_1, \dots, s_j]$ avec

$$T_j s_i = \theta_i s_i, \quad \|s_i\| = 1, \quad i = 1, \dots, j$$

et

$$Y_j = (y_1, \dots, y_j) \text{ avec } y_i = V_j s_i; \quad i = 1, \dots, j$$

La matrice S_j est unitaire, c'est-à-dire $S_j^* S_j = S_j S_j^* = I_j$.

$$\text{Ecrivons } V_j^* V_j = L_j + I_j + L_j^*$$

où L_j est la matrice triangulaire inférieure définie par :

$$\begin{cases} L_j(i,i) = 0 & i = 1, \dots, j \\ L_j(i,k) = v_i^* v_k, & i = 2, \dots, j \quad \text{et} \quad k = 1, \dots, i-1 \end{cases}$$

Puisque la perte d'orthogonalité globale se constate surtout sur les dernières lignes de L_j , considérons à l'étape $j+1$, la dernière ligne de L_{j+1} , c'est-à-dire $e_{j+1}^* L_{j+1}$.

On a :

$$e_{j+1}^* L_{j+1} = v_{j+1}^* V_j$$

Donc

$$\|e_{j+1}^* L_{j+1}\| = \|v_{j+1}^* v_j\| = \|v_{j+1}^* Y_j S_j^{-1}\| = \|v_{j+1}^* Y_j\|$$

car

$$\|S_j^{-1}\| = 1$$

Donc, pour préserver l'orthogonalité globale des vecteurs de Lanczos, il suffit d'orthogonaliser v_{j+1} contre les vecteurs de Ritz ayant déjà convergé. On verra plus loin, comment reconnaître ces vecteurs. Cette stratégie est peu coûteuse par rapport à la réorthogonalisation totale de A , surtout lorsqu'on ne cherche que quelques éléments propres de A .

Remarques

1. On stockera tous les vecteurs de Ritz ayant convergé, même ceux dont on n'a pas besoin.
2. Puisque $e_{j+1}^* L_{j+1} = v_{j+1}^* v_j$, on peut préserver l'orthogonalité des vecteurs de Lanczos en orthogonalisant v_{j+1} contre v_1, \dots, v_j mais ceci nécessite plus de calculs et la présence en mémoire de tous les v_i .
3. Il reste la question de savoir si la perte d'orthogonalité globale ne peut pas avoir lieu bien avant la convergence d'un vecteur de Ritz. Il a été montré [10, 13] que cette perte est une preuve de convergence d'au moins un vecteur de Ritz.

Exemple

Avec cette stratégie de réorthogonalisation, l'exemple du II.2 donne :

$$V_8^H V_8 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 7.9 \cdot 10^{-13} & -1.6 \cdot 10^{-12} & 0 & 0 \\ & 1 & 0 & 0 & -3.4 \cdot 10^{-13} & 6.9 \cdot 10^{-13} & 0 & 0 \\ & & 1 & 0 & 3.9 \cdot 10^{-13} & -8.1 \cdot 10^{-13} & 0 & 0 \\ & & & 1 & -3.2 \cdot 10^{-13} & 6.7 \cdot 10^{-13} & 0 & 0 \\ & & & & 1 & -1.05 \cdot 10^{-13} & 0 & 0 \\ \text{symétrique} & & & & & 1 & 0 & 0 \\ & & & & & & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$Y_8^H Y_8 = \begin{bmatrix} 1 & -2.6 \cdot 10^{-6} & 1.8 \cdot 10^{-7} & 3.6 \cdot 10^{-8} & -5.3 \cdot 10^{-8} & 5.4 \cdot 10^{-8} & -5.4 \cdot 10^{-8} & 5.4 \cdot 10^{-8} \\ & 1 & -3.08 \cdot 10^{-5} & -9.5 \cdot 10^{-6} & 3.8 \cdot 10^{-6} & -3.07 \cdot 10^{-6} & 2.97 \cdot 10^{-6} & -2.96 \cdot 10^{-6} \\ & & 1 & -2.1 \cdot 10^{-5} & -1.4 \cdot 10^{-6} & 4.4 \cdot 10^{-6} & -4.8 \cdot 10^{-6} & 4.8 \cdot 10^{-6} \\ & & & 1 & 1.1 \cdot 10^{-3} & 1.8 \cdot 10^{-4} & -1.7 \cdot 10^{-4} & 1.7 \cdot 10^{-4} \\ & & & & 1 & 1.5 \cdot 10^{-5} & 5.2 \cdot 10^{-6} & -4.7 \cdot 10^{-6} \\ \text{symétrique} & & & & & 1 & 1.6 \cdot 10^{-6} & 1.1 \cdot 10^{-6} \\ & & & & & & 1 & -7.8 \cdot 10^{-7} \\ & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

$sp(T_8) = sp(A)$ avec $2 \cdot 10^{-8}$ comme plus grande erreur.

A l'étape 8, les vecteurs de Ritz correspondant aux 4^e et 5^e valeurs sont encore "un peu loin" de la convergence.

II.4 CRITERE DE CONVERGENCE

En utilisant la notation matricielle, on a, à l'étape j :

$$AV_j - V_j T_j = \beta_{j+1} v_{j+1} e_j^* + F_j$$

où F_j est la matrice des erreurs de calculs.

Donc

$$AV_j s_i - V_j T_j s_i = \beta_{j+1} v_{j+1} s_i^{(j)} + F_j s_i$$

où $s_i^{(j)}$ désigne la j^{ième} (dernière) coordonnée de s_i

d'où

$$\|Ay_i - \theta_i y_i\| = \beta_{j+1} |s_i^{(j)}| + \|F_j s_i\|$$

En minimisant $\|F_j\|$, la quantité $\beta_{ji} = \beta_{j+1} |s_i^{(j)}|$ est donc la norme résiduelle du i^{ème} couple de Ritz à l'étape j. Celui-ci est estimé

satisfaisant si β_{ji} est inférieur à la précision relative souhaitée par l'utilisateur.

L'algorithme dans ses grandes lignes sera alors :

$$u \neq 0, \beta_1 := \|u\| ; v_0 := 0 ; v_1 := \frac{u}{\beta_1} ;$$

étape j

$$u := Av_j - \beta_j v_{j-1} ;$$

$$\alpha_j := v_j^* u ;$$

$$u := u - \alpha_j v_j ;$$

$$\beta_{j+1} := \|u\| ;$$

si $\beta_{j+1} = 0$ alors arrêter ;

$$v_{j+1} := \frac{u}{\beta_{j+1}} ;$$

Calculer

$$\text{sp}(T_j) = \left\{ \theta_i \right\}_{i=1}^j ;$$

Calculer si nécessaire s_i tel que

$$T_j s_i = \theta_i s_i, \|s_i\| = 1$$

Pour chaque s_i calculé

$$\left| \begin{array}{l} \text{calculer } \beta_{ji} := \beta_{j+1} |s_i^{(j)}| ; \end{array} \right.$$

$$\left| \begin{array}{l} \text{si } \beta_{ji} \leq \varepsilon \text{ alors calculer et stocker } y_i = V_i s_i \end{array} \right.$$

orthogonaliser v_{j+1} contre les y_i stockés

normer v_{j+1}

Remarques

1. En calculant $\alpha_j = v_j^* u$, on utilise implicitement l'orthogonalité de v_{j-1} et v_j ; en effet $\alpha_j = v_j^* Av_j$.
2. Comme le montrent les théorèmes cités, l'algorithme de Lanczos permet d'approcher mieux les éléments extrêmes du spectre. Lorsqu'on est intéressé par quelques-uns de ces éléments, on arrêtera l'itération après la convergence d'un nombre suffisant de vecteurs de Ritz.

Lorsqu'on ne cherche que quelques éléments d'une extrémité du spectre, l'algorithme calculera également ceux de l'autre extrémité ; on placera un compteur pour déchiffrer le nombre de vecteurs de Ritz ayant convergé et provenant de l'extrémité désirée ; mais le problème devient délicat lorsque les valeurs propres désirées ne sont pas bien séparées du reste du spectre.
3. Sauf accumulation d'erreurs de calculs à la suite d'un grand nombre d'itérations (dans le cas d'une convergence lente) pouvant permettre l'obtention de directions propres non parallèles pour des valeurs propres voisines provenant de la perturbation d'une valeur propre multiple, l'algorithme proposé ne permet pas de calculer plus d'une direction propre associée à une valeur propre multiple. cf. [7, 8, 17, 25] pour la méthode de Lanczos par blocs ou [15].
4. Pour la diagonalisation de T_j , il est préférable d'utiliser une méthode permettant de ne plus avoir à calculer les valeurs propres ayant déjà convergé (par exemple la méthode de la bissection). La méthode d'itération inverse remplit cette condition pour les vecteurs propres.



TROISIEME PARTIE

ITÉRATIONS SIMULTANÉES
POUR UNE MATRICE NON SYMÉTRIQUE



On suppose dans toute la suite que la matrice $A(n,n)$ est non symétrique et on désire calculer ses r plus grandes valeurs propres en module ($r \ll n$) ainsi que des vecteurs propres associés.

1. Deux difficultés majeures

La méthode des itérations simultanées présentée aux chapitres précédents se résume comme suit :

- (I.S.)
1. Partir de X telle que $X^* X = I$; ($X(n, r)$)
 2. faire k pas de
$$\left| \begin{array}{l} U = Ax = QR \\ X \leftarrow Q \end{array} \right.$$
 3. Former et diagonaliser $B = Q^* A Q$, soit $B = F D F^{-1}$
(F est la matrice des vecteurs propres de B et D la diagonale des valeurs propres).
 4. Calculer $X = Q F$ (dont les colonnes approchent les directions propres cherchées)
 5. Test de convergence sur X : si convergence alors fin
sinon retourner à 2.

Lorsque la matrice A n'est pas symétrique, l'étape 3 peut poser les problèmes suivants :

- la matrice B peut ne pas être diagonalisable, auquel cas on n'a pas suffisamment de vecteurs propres pour engendrer le sous-espace dominant,
- même si B est diagonalisable, certains de ses vecteurs propres peuvent être presque dépendants (même correspondant à des valeurs propres bien séparées) : d'où une mauvaise base pour le sous-espace dominant.

Il est alors nécessaire d'éviter le calcul direct des vecteurs propres cherchés.

2. Utilisation de la forme de Schur pour la recherche d'une base orthonormée du sous-espace dominant

Lemme

Soit U une matrice $n \times r$.

Les colonnes de U et celles de UR avec $R(r, r)$ régulière engendrent le même sous-espace.

En effet :

$$x = Uy = URR^{-1}y = UR(R^{-1}y)$$

$$z = (UR)y = R(Ry)$$

On a le théorème d'existence suivant :

Théorème (Schur)

Etant donné une matrice carrée A , $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, il existe une matrice unitaire X telle que la matrice $T = X^* A X$ soit triangulaire supérieure ; de plus, on peut choisir X telle que les éléments diagonaux de T , c'est-à-dire $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ apparaissent dans cet ordre.

Preuve [4, 5]

Les matrices T et X sont respectivement appelées forme de Schur et base de Schur de A ; X est définie à une diagonale unitaire près suivant l'ordre choisi pour les valeurs propres μ_i , $i = 1, \dots, n$.

Remarque Si A est réelle, la matrice T peut être bloc-triangulaire, les blocs diagonaux sont d'ordre 2 et admettent des valeurs propres de même module.

Considérons la $k^{\text{ième}}$ itération de (I.S.).

Soit $B_k = Q_k^* A Q_k$ et $T_k = X_k^* B_k X_k$ la forme de Schur de B_k .

Puisque X_k est régulière (car unitaire), d'après le lemme ci-dessus, Q_k est une base orthonormée de $A^k S$ où $S = \text{lin } X$. Cette base joue un rôle important comme nous le verrons ci-dessous.

3. Approximation des éléments propres dominants de A

Soit

$$(\theta_i^{(k)}, v_i^{(k)}) , i = 1, 2, \dots, r$$

les couples propres de T_k :

$$T_k v_i^{(k)} = \theta_i v_i^{(k)} , \|v_i^{(k)}\| = 1 , i = 1, \dots, r$$

on a

$$B_k X_k = X_k T_k$$

donc

$$B_k X_k v_i^{(k)} = X_k T_k v_i^{(k)} = \theta_i^{(k)} X_k v_i^{(k)} , i = 1, \dots, r$$

d'où $(\theta_i^{(i)}, X_k v_i^{(k)}) , 1 \leq i \leq r$

sont les couples propres de B_k ; par suite, à la $k^{\text{ième}}$ itération, les couples $(\theta_i^{(k)}, Q_k X_k v_i^{(k)})$ sont pris pour approximations de (μ_i, ϕ_i) , $i = 1, \dots, r$.

Faisons le rapprochement avec le 4ème point de (I.S.)

Soit V_k la matrice

$$V_k = [v_1^{(k)}, \dots, v_r^{(k)}].$$

La base orthonormée Q_k de $A^k S$ est remplacée par $Q_k X_k$ et la matrice F_k des vecteurs propres de B_k est remplacée par la matrice V_k des vecteurs propres de la forme de Schur de B_k .

On procédera alors comme suit :

1. Partir de X telle que $X^* X = I$
2. Faire k pas de $\left\{ \begin{array}{l} U = AX = QR \\ X \leftarrow Q \end{array} \right.$
3. Former $B = Q^* A Q$ puis calculer la forme de Schur de B , $T = Y^* B Y$ et ses éléments propres
(soit V la matrice des vecteurs propres de T)

4. Calculer $X = QY$
5. Test de convergence sur XV : si convergence alors fin sinon retourner à 2.

Remarque

Comme remarqué au chapitre 1, lorsque $|\lambda_r| = |\lambda_{r+1}|$, on n'a pas convergence en général (non obtention de la $r^{\text{ième}}$ valeur propre). Afin de minimiser ce risque, on peut itérer sur p vecteurs, $p > r+1$ mais $p \ll n$.

Posons

$$B_k = (b_{ij}^{(k)}) , T_k = (t_{ij}^{(k)})$$

et

$$X_k = (x_{ij}^{(k)}) , i, j = 1, 2, \dots, p$$

et supposons que X_k est telle que

$$|\theta_1^{(k)}| \gg |\theta_2^{(k)}| \gg \dots \gg |\theta_p^{(k)}| \quad (*)$$

on a

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^p b_{is}^{(k)} x_{sj}^{(k)} &= \sum_{s=1}^p x_{is}^{(k)} t_{sj}^{(k)} , i = 1, \dots, p \text{ et } j = 1, \dots, r \quad \text{car} \\ & \qquad \qquad \qquad B_k X_k = X_k T_k \\ &= \sum_{s=1}^r x_{is}^{(k)} t_{sj}^{(k)} , i = 1, \dots, p, j = 1, \dots, r \quad \text{car} \\ & \qquad \qquad \qquad T_k \text{ est triangulaire supérieure} \end{aligned}$$

donc $B_k X'_k = X'_k T'_k$ où $X'_k(p, r)$ et $T'_k(r, r)$ sont respectivement les matrices formées par les r premières colonnes de X_k et T_k

Par suite, l'espace engendré par les colonnes de X'_k est invariant par B_k et la restriction de B_k à cet espace a pour spectre $sp(T'_k) = \left\{ \theta_i^{(k)} \right\}_{i=1}^r$.

On en déduit que sous la condition (*), même en itérant sur p vecteurs ($p \geq r+1$), le test d'arrêt pourra se faire seulement sur les r premières colonnes de $Q_k X_k V_k$.

Pour la convergence de $Q_k X_k V_k$ voir [24].

4. Calcul de la forme de Schur et de ses éléments propres d'une matrice carrée A

a. Forme de Schur

Elle se calcule par l'algorithme QR défini par :

$$\left| \begin{array}{l} A = A_1 = Q_1 R_1 \text{ (factorisation QR : Q unitaire, R triangulaire} \\ \text{supérieure)} \\ \text{pour } k \geq 1 \text{ faire} \\ A_{k+1} = R_k Q_k = Q_{k+1} R_{k+1} \end{array} \right.$$

La forme et la base de Schur de A s'obtiennent respectivement comme "limites" de $A_{k+1} = (Q_1 \dots Q_k)^* A (Q_1 \dots Q_k)$

et $S_k = Q_1 \dots Q_k$

En pratique, on réduira d'abord A par similitude unitaire sous forme d'une matrice de Hessenberg supérieure. Si Y est la base de Schur de la forme Hessenberg A_H de A, celle de A est alors XY avec $A = X A_H X^*$.

b. Éléments propres de la forme de Schur

Le calcul des valeurs propres est immédiat sur la forme de Schur de A. Nous utilisons l'itération inverse pour le calcul de la direction propre normalisée associée à une valeur propre simple λ dont une approximation est σ ; cette itération est définie par :

- partir de x_0 tel que $x_0^* x_0 = 1$
- pour $k \geq 0$ faire

$$(\Lambda - \sigma I)y_{k+1} = x_k$$

$$x_{k+1} = \frac{y_{k+1}}{\|y_{k+1}\|}$$

C'est en fait la méthode de la puissance sur $(\Lambda - \sigma I)^{-1}$. La suite y_k converge vers la direction propre associée à λ comme

$$\frac{|\lambda - \sigma|}{\max_{\mu_i \neq \lambda} |\mu_i - \sigma|}$$

Dans le cas d'une valeur propre multiple non défective, on utilise les itérations inverses simultanées (cf page 41).

Remarques

- Lorsque Λ est une matrice réelle, les calculs peuvent se faire en arithmétique réelle même si λ est complexe. En effet : posons

$$\sigma = \alpha + i\beta \quad \text{et} \quad x_k = p_k + iq_k, \quad y_{k+1} = u_{k+1} + iv_{k+1},$$

$p_k, q_k, v_{k+1}, u_{k+1}$ étant des vecteurs de \mathbb{R}^n

on a

$$(\Lambda - \sigma I)y_{k+1} = x_k \Leftrightarrow \begin{cases} (\Lambda - \alpha I)u_{k+1} + \beta v_{k+1} = p_k & (1) \\ -\beta u_{k+1} + (\Lambda - \alpha I)v_{k+1} = q_k & (2) \end{cases}$$

En faisant (1) $\times (\Lambda - \alpha I) - (2) \times \beta$ et (1) $\times \beta + (2) \times (\Lambda - \alpha I)$

on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} [(A - \alpha I)^2 + \beta^2 I] u_{k+1} = (A - \alpha I)p_k - \beta q_k \\ [(A - \alpha I)^2 + \beta^2 I] v_{k+1} = \beta p_k + (A - \alpha I)q_k \end{array} \right.$$

L'itération sera alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \square \text{ partir de } p_0 \text{ (normé) et } q_0 \text{ (qu'on peut prendre égal à 0)} \\ \square \text{ pour } k \geq 0 \quad \text{faire} \\ \quad [(A - \alpha I)^2 + \beta^2 I] u_{k+1} = (A - \alpha I)p_k - \beta q_k \\ \quad \quad \quad \beta v_{k+1} = p_k - (A - \alpha I)u_{k+1} \\ \square p_{k+1} + i q_{k+1} = \frac{u_{k+1} + i v_{k+1}}{\|u_{k+1} + i v_{k+1}\|} \end{array} \right.$$

On remarque que la matrice du système est formée une fois pour toutes.

- Si λ est une valeur propre déficiente de multiplicités algébrique et géométrique m et g ($m > g$), les m vecteurs solutions du système $(A - \sigma I)Y_{k+1} = Q_k$ tendent vers la dépendance : Y_k tend à devenir de rang g .

Voir [3, 26] pour une analyse d'erreurs et une autre méthode possible stable : les itérations de Newton simultanées.

5. Exemple (sur IBM.PC)

$$A = (a_{ij}) \quad \text{avec}$$

$$a_{1j} = 1, \quad j = 1, \dots, n$$

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

On prend $n = 80$ et $r = 5$. Le critère de convergence est que la norme résiduelle $\|A\phi_i - \mu_i\phi_i\|$ soit inférieure à 10^{-5} .

LES 5 VALEURS PROPRES DOMINANTES DE A SONT :

P.R = 3.49117028023927E+000	P.I = 0.00000000000000E+000
P.R = -1.32940922644006E-001	P.I = 3.82902480628572E-001
P.R = -1.32940922644006E-001	P.I = -3.82902480628572E-001
P.R = -3.91356826302815E-002	P.I = 0.00000000000000E+000
P.R = -1.14206379441190E-002	P.I = 0.00000000000000E+000

LES NORMES RESIDUELLES RESPECTIVES SONT :

5.08137171765964E-009
3.09111870680725E-007
3.09111870680725E-007
6.73470610751614E-006
6.50662318008726E-008

CONCLUSION

Le premier chapitre montre la non-nécessité, dans le cas de non convergence de la méthode de la puissance, des itérations simultanées sur deux vecteurs pour la détermination des deux éléments propres dominants d'une matrice dont le spectre vérifie la séparation

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\mu_3| \gg \dots \gg |\mu_n|$$

Si cette séparation n'est pas satisfaite ($|\lambda_2| = |\mu_3|$), on itérera alors sur au moins trois vecteurs.

Les cycles-limites décrits - dans certains cas - par les suites Q_k et B_k des itérations simultanées en présence de valeurs propres distinctes de même module ont plus d'intérêt théorique que pratique, leur nombre n'influant pas sur le calcul effectif des éléments propres cherchés.

Dans le second chapitre, nous avons plus mis l'accent sur les itérations simultanées de Tchebycheff que sur l'algorithme de Lanczos du fait du but visé : le remplacement du module de diagonalisation du progiciel INDA [2] où seuls interviennent quelques éléments propres dominants avec toutes les directions propres pour une valeur propre multiple. Ceci, dans le cas de Lanczos, supposerait la méthode par blocs dont la taille doit être égale au nombre d'éléments propres cherchés ou l'algorithme proposé par B. PARLETT et D.S. SCOTT [15] ; mais chacune de ces deux méthodes calcule aussi les éléments de l'autre extrémité du spectre.

Nous sommes très loin d'avoir abordé, dans le troisième chapitre, toute la complexité des itérations simultanées pour une matrice non symétrique ; il existe d'autres méthodes telles que l'algorithme de Lanczos non symétrique [2, 16], la méthode d'Arnoldi [18, 21], la méthode d'Arnoldi-Tchebycheff [23] pour ne citer que celles-ci.

Il serait néanmoins intéressant de pouvoir appliquer une technique d'accélération de type Tchebycheff ou Arnoldi-Tchebycheff à l'algorithme basé sur l'utilisation de la forme de Schur.



BIBLIOGRAPHIE



- [1] J.R. BARRA, M. BECKER, D. BELAID, F. CHATELIN
Un logiciel d'Analyse Factorielle. Une maquette systolique
programmable
R.R. 450, Juin 1984, IMAG Grenoble

- [2] D. BELAID
Progiciel INDA pour l'Analyse des Données
Thèse 3ème cycle Grenoble (1985)

- [3] F. CHATELIN
Valeurs propres de matrices
Masson, Paris (à paraître)

- [4] F. CHATELIN
Spectral approximation of linear operators
Academic Press, New-York (1983)

- [5] P.G. CIARLET
Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation
Masson, Paris (1982)

- [6] A. CLAYTON
Further results on polynomials having least maximum modulus on an
ellipse in the complexe plane
Techn. Rep. AEEW-73 8, UKAEA, Harwell

- [7] J. CULLUM & W.E. DONATH
A block generalisation of the symmetric s-steps Lanczos algorithm
Rep. RC 4845, IBM Research, Yorktown Heights N.Y. 1974

- [8] G.H. GOLUB and R. UNDERWOOD
The block Lanczos method for computing eigenvalues
Proc. Sym. Math. Software Madison Wisc 1977 Acad. Press

- [9] A. JENNINGS & W.J. STEWART
Simultaneous iteration algorithm for real matrices
ACM Trans. Math. Software 7, 1981 pp. 351-361
- [10] C.C. PAIGE
The computation of eigenvalues and eigenvectors of very large
sparse matrices
Ph.D Thesis University of London (1971)
- [11] C.C. PAIGE
Error Analysis of the Lanczos Algorithm for tridiagonalizing a
symmetric matrix
J. Inst. Math. Appl. 18, 341-349 (1976)
- [12] B.N. PARLETT
The Symmetric Eigenvalue Problem
Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ (1980)
- [13] B.N. PARLETT
"Cours et Séminaires" Problèmes spectraux
INRIA, Centre de Sophia-Antipolis Valbonne (12 septembre 85)
- [14] B.N. PARLETT & W.G. POOLE Jr (1973)
A geometric theory for the QR, LU and power iterations
SIAM J. Numer. Anal. 8, pp. 389-412
- [15] B.N. PARLETT & D.S. SCOTT
The lanczos algorithm with selective orthogonalization
Math. Comp., 33, 217-238 (1979)
- [16] B.N. PARLETT & D. TAYLOR
A look ahead Lanczos algorithm for unsymmetric matrices
Tech. Rep. PAM-43, Berkeley (1981)
- [17] A. RUHE
Implementation aspects of band Lanczos algorithms for computation
of eigenvalues of large sparse symmetric matrices
Univeristy of California (1978)

- [18] A. RUHE
The two-sided Arnoldi Algorithm for nonsymmetric eigenvalue problem.
Institute of information Processing University of Umea
S-90187 Umea Sweden
- [19] R. RUTISHAUSER
Computational Aspects of F.L. Bauer's simultaneous Iteration Method
Num. Math. 13, 4-13 (1969)
- [20] Y. SAAD
On the rates of convergence of the Lanczos and block-Lanczos
methods
SIAM J. Numer. Anal. 17, 687-706
- [21] Y. SAAD
Variations on Arnoldi's method for computing eigenelements of
large unsymmetric matrices
Linear Algebra and its Applications 34, 269-295 (1980)
- [22] Y. SAAD
The Lanczos biorthogonalization algorithm and other oblique pro-
jection methods for solving large unsymmetric systems
SIAM J. Num. Anal. 19, 485-506 (1982)
- [23] Y. SAAD
"Cours et Séminaires" Problèmes spectraux
INRIA Centre Sophia-Antipolis (septembre 85)
- [24] G.W. STEWART
Simultaneous Iteration for Computing Invariant Subspaces of non-
hermitian matrices
Num. Math. 25, 123-136 (1976)
- [25] R. UNDERWOOD
An iterative block Lanczos method for the solution of large sparse
symmetric eigenproblems
Rep. STAN-CS-75-496 Stanford University (1975)
- [26] J.H. WILKINSON
The algebraic eigenvalue problem
Oxford Univ. Press (Clarendon), London and New-York (1967)

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

Président : Daniel BLOCH
Vice-Présidents : B. BAUDELET
H. CHERADAME
R. CARRE
J.M. PIERRARD

Année universitaire 1984-1985

Professeurs des Universités

E.N.S.E.E.G.

BESSON	Jean	LOUCHET	François
BONNETAIN	Lucien	PARIAUD	Jean-Charles
BONNIER	Etienne	RAMEAU	Jean-Jacques
DURAND	François	SOHM	Jean-Claude
GUYOT	Pierre	SOUQUET	Jean-Louis

E.N.S.E.R.G.

BARIBAUD	Michel	GENTY	Pierre
BLIMAN	Samuel	GUERIN	Bernard
BUYLE BODIN	Maurice	POUPOT	Christian
CHENEVIER	Pierre	SERMET	Pierre
COHEN	Joseph	ZADWORNY	François
COUMES	André		

E.N.S.I.E.G.

BARRAUD	Alain	JOUBERT	Jean-Claude
BAUDELET	Bernard	JOURDAIN	Geneviève
BLOCH	Daniel	LACOUME	Jean-Louis
BRISSONNEAU	Pierre	LONGEQUEUE	Jean-Pierre
CAVAIGNAC	Jean-François	MASSELOT	Christian
CHARTIER	Germain	MORET	Roger
CHERUY	Arlette	PAUTHENET	René
DURAND	Jean-Louis	PERRET	René
FELICI	Noël	PERRET	Robert
FOULARD	Claude	POLOUJADOFF	Michel
GAUBERT	Claude	SABONNADIÈRE	Jean-Claude
IVANES	Marcel	SCHLENKER	Claire
JALINIER	Jean-Michel	SCHLENKER	Michel
JAUSSAUD	Pierre		

E.N.S.H.G.

BOIS	Philippe	LESPINARD	Georges
BOUVARD	Maurice	MOREAU	René
LESIEUR	Marcel	PIAU	Jean-Michel

E.N.S.I.M.A.G.

**ANCEAU
FONLUPT
LATOMBE
MAZARE**

**François
Jean
Jean-Claude
Guy**

**MOSSIÈRE
ROBERT
SAUCIER
VEILLON**

**Jacques
François
Gabrielle
Gérard**

U.E.R.M.C.P.P.

**CHERADAME
CHIAVERINA
GANDINI**

**Hervé
Jean
Alessandro**

**RENAUD
ROBERT
SILVY**

**Maurice
André
Jacques**

Professeurs Associés

**BLACKWELDER
HAYASHI
PURDY**

**Ronald
Hirashi
Gary**

**ENSHG
ENSIEG
ENSEEG**

Professeurs à l'Université des Sciences Sociales (Grenoble II)

**BOLLIET
CHATELIN**

**Louis
Françoise**

Chercheurs du C.N.R.S.

Directeurs de recherche :

**CARRE
FRUCHARD
JORRAND
VACHAUD**

**René
Robert
Philippe
Georges**

Maître de recherche :

**ALLIBERT
ANSARA
ARMAND
BINDER
BORNARD
DAVID
DESPORTES
DRIOLE
GIGNOUX
GIVORD
GUELIN
HOPFINGER**

**Michel
Ibrahim
Michel
Gilbert
Guy
René
Jacques
Jean
Damien
Dominique
Pierre
Emile**

**JOUD
KAMARINOS
KLEITZ
LANDAU
LASJAUNIAS
MERMET
MUNIER
PIAU
PORTESEIL
THOLENCE
VERDILLON
SUERY**

**Jean-Charles
Georges
Michel
Ioan-Dore
Jean-Claude
Jean
Jacques
Monique
Jean-Louis
Jean-Louis
André
Michel**

Personnalités habilitées à diriger des travaux de recherche
(Décision du conseil scientifique)

E.N.S.E.E.G.

ALLIBERT	Colette	HAMMOU	Abdelkader
BERNARD	Claude	MALMEJAC	Yves (CENG)
BONNET	Roland	MARTIN GARIN	Régina
CAILLET	Marcel	NGUYEN TRUONG	Bernadette
CHATILLON	Catherine	RAVAINE	Denis
CHATILLON	Christian	SAINFORT	(CENG)
COULON	Michel	SARRAZIN	Pierre
DIARD	Jean-Paul	SIMON	Jean-Paul
EUSTATHOPOULOS	Nicolas	TOUZAIN	Philippe
FOSTER	Panayotis	URBAIN	Georges(ODEILLO)
GALERIE	Alain		

E.N.S.E.R.G.

BARIBAUD	Michel	DOLMAZON	Jean-Marc
BOREL	Joseph	HERAULT	Jeanny
CHOVET	Alain	MONLLOR	Christian
CHEHIKIAN	Alain		

E.N.S.I.E.G.

BORNARD	Guy	LEJEUNE	Gérard
DESCHIZEAUX	Pierre	MAZUER	Jean
GLANGEAUD	François	PERARD	Jacques
KOFMAN	Walter	REINISCH	Raymond

E.N.S.H.G.

ALEMANY	Antoine	OBLED	Charles
BOIS	Daniel	ROWE	Alain
DARVE	Félix	VAUCLIN	Michel
MICHEL	Jean-Marie	WACK	Bernard

E.N.S.I.M.A.G.

BERT	Didier	DELLA DORA	Jean
CALMET	Jacques	FONLUPT	Jean
COURTIN	Jacques	SIFAKIS	Joseph
COURTOIS	Bernard		

U.E.R.M.C.P.P.

CHARUEL	Robert
---------	--------

C.E.N.G.

CADET	Jean	NIFENECKER	Hervé
COEURE	Philippe (LETI)	PERROUD	Paul
DELHAYE	Jean-Marc (STT)	PEUZIN	Jean-Claude(LETI)
DUPUY	Michel (LETI)	TAIEB	Maurice
JOUVE	Hubert (LETI)	VINCENDON	Marc
NICOLAU	Yvan (LETI)		

Laboratoires extérieurs

C.N.E.T.

DEMOULIN
DEVINE
GERBER

Eric
R.A.B.
Roland

MERCKEL
PAULEAU

Gérard
Yves

I.N.S.A. Lyon

GAUBERT

C.

ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DES MINES DE SAINT-ETIENNE

Directeur : M. M. MERMET
Directeur des Etudes et de la formation : M. J. LEVASSEUR
Directeur des Recherches : M. J. LEVY
Secrétaire Général : M^{lle} M. CLERGUE

Professeurs de la 1ère Catégorie

COINDE	Alexandre	Gestion
GOUX	Claude	Metallurgie
LEVY	Jacques	Métallurgie
LOWYS	Jean-Pierre	Physique
MATHION	Albert	Gestion
RIEU	Jean	Mécanique-Résistance des matériaux
SOUSTELLE	Michel	Chimie
FORMERY	Philippe	Mathématiques Appliquées

Professeurs de 2ème catégorie

HABIB	Michel	Informatique
PERRIN	Michel	Géologie
VERCHERY	Georges	Matériaux
TOUCHARD	Bernard	Physique industrielle

Directeur de recherche

LESBATS	Pierre	Métallurgie
---------	--------	-------------

Maîtres de recherche

BISCONDI	Michel	Métallurgie
DAVOINE	Philippe	Géologie
FOURDEUX	Angeline	Métallurgie
KOBYLANSKI	André	Métallurgie
LALAUZE	René	Chimie
LANCELOT	Francis	Chimie
LE COZE	Jean	Métallurgie
THEVENOT	François	Chimie
TRAN MINH	Canh	Chimie

Personnalités habilitées à diriger des travaux de recherche

DRIVER	Julian	Métallurgie
GUILHOT	Bernard	Chimie
THOMAS	Gérard	Chimie

Professeur à l'UER de Sciences de Saint-Etienne

VERGNAUD	Jean-Maurice	Chimie des Matériaux & chimie industrielle
----------	--------------	--



AUTORISATION de SOUTENANCE

VU les dispositions de l'article 3 de l'arrêté du 16 avril 1974

VU le rapport de présentation de Madame le Professeur CHATELIN

Monsieur DIAMOUTANI Mamadou

est autorisé à présenter une thèse en soutenance en vue de l'obtention du titre de
DOCTEUR de TROISIEME CYCLE, spécialité "Mathématiques appliquées".

Grenoble, le 10 octobre 1986

D. BLOCH
Président
de l'Institut National Polytechnique
de Grenoble

P.O. le Vice-Président.

