Décompositions LU et Cholesky

- Allaire, *Algèbre linéaire numérique.* (113-122)

Décomposition LU :
Soit $A = (a_{i,j})_{i,j\in[\![1,n]\!]} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{K})$ telle que toutes les sous-matrices diagonales

$$\Delta_k = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k,1} & \cdots & a_{k,k} \end{pmatrix} \quad \text{avec } k \in [\![1,n]\!]$$

soient inversibles. Alors, il existe une matrice $L = (\ell_{i,j})_{i,j\in[\![1,n]\!]}$ triangulaire inférieure avec $\forall i \in [\![1,n]\!],\ \ell_{i,i} = 1$ et une matrice U triangulaire supérieure telles que $A = LU$. De plus, cette décomposition est unique.

Démonstration.
- **Existence :** Supposons qu'au cours de l'élimination de Gauss il n'y ait pas besoin de faire de permutations pour changer de pivot, i.e. tous les pivots naturels $a_{k,k}^{(k)}$ sont non nuls. On crée par récurrence des matrices $A^{(k)} = (a_{i,j}^{(k)})_{i,j\in[\![1,n]\!]}$ en posant $A^{(1)} = A$ puis pour tout $k \in [\![1,n-1]\!],\ A^{(k+1)} = E_k A^{(k)}$ avec

$$E_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & -\ell_{k+1,k} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots \\ & & & -\ell_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix} \text{ où } \ell_{i,k} = \frac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}} \text{ donc } A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(1)} & \star & \cdots & & & \star \\ & \ddots & & & & \vdots \\ & & a_{k,k}^{(k)} & & & \\ & & \star & \star & \cdots & \star \\ & & \vdots & & \ddots & \star \\ & & \star & \cdots & \star & \star \end{pmatrix}$$

On pose alors $U = A^{(n)} = E_{n-1} \dots E_1 A$ et $L = E_1^{-1} \dots E_{n-1}^{-1}$. Donc $A = LU$.
Par construction U est triangulaire supérieure. Et il est facile de voir que

$$E_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & \ell_{k+1,k} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots \\ & & & \ell_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix} \quad \text{donc} \quad L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \ell_{2,1} & \ddots & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \ell_{n,1} & \cdots & \ell_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}$$

On va maintenant vérifier par récurrence que les pivots choisis sont non nuls.
Pour tout $k \in [\![1,n]\!]$, on pose $H_k : a_{k,k}^{(k)} \neq 0$.
Comme $a_{1,1} = \Delta_1$ qui est inversible alors H_1 est vraie.
Soit $k \in [\![2,n]\!]$ tel que $H_1, \dots, H_{k-1}$ soient vraies. Comme les $k-1$ premiers pivots sont non nuls alors on peut alors construire $A^{(k)}$ sans problème. Or $A = E_1^{-1} \dots E_{k-1}^{-1} A^{(k)}$.
On écrit cette égalité sous forme de matrices par blocs

$$\begin{pmatrix} L_{1,1}^{(k)} & 0 \\ L_{2,1}^{(k)} & I_{n-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1,1}^{(k)} & A_{1,2}^{(k)} \\ A_{2,1}^{(k)} & A_{2,2}^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta_k & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{pmatrix}$$

où $L_{1,1}^{(k)}, U_{1,1}^{(k)}, \Delta_k \in \mathcal{M}_k(\mathbb{K})$, $L_{2,1}^{(k)}, A_{2,1}^{(k)}, A_{2,1} \in \mathcal{M}_{n-k,k}(\mathbb{K})$, $A_{1,2}^{(k)}, A_{1,2} \in \mathcal{M}_{k,n-k}(\mathbb{K})$ et $A_{2,2}^{(k)}, A_{2,2} \in \mathcal{M}_{n-k}(\mathbb{K})$. Par multiplication de matrices par blocs, $L_{1,1}^{(k)} U_{1,1}^{(k)} = \Delta_k$.

Comme $L_{1,1}^{(k)}$ est triangulaire inférieure avec des 1 sur sa diagonale alors elle est inversible et $U_{1,1}^{(k)} = (L_{1,1}^{(k)})^{-1}\Delta_k$ aussi comme produit de matrices inversibles. Son déterminant est non nul et c'est une matrice triangulaire supérieure avec $a_{1,1}^{(1)}, \dots, a_{k,k}^{(k)}$ comme coefficients diagonaux. Donc $\prod_{i=1}^{k} a_{i,i}^{(i)} \neq 0$. Et par conséquent, $a_{k,k}^{(k)} \neq 0$. D'où H_k.

• **Unicité :** Soit (L_1, U_1) une autre décomposition de A. Comme $A = LU = L_1U_1$ alors $L^{-1}L_1 = UU_1^{-1}$. Comme L est triangulaire inférieure alors L^{-1} aussi.
Ainsi, $L^{-1}L_1$ est triangulaire inférieure. De même, UU_1^{-1} est triangulaire supérieure. Donc, $L^{-1}L_1$ et UU_1^{-1} sont diagonales et la diagonale de $L^{-1}L_1$ est uniquement composée de 1. Finalement, $L^{-1}L_1 = UU_1^{-1} = I_n$. D'où l'unicité. □

Décomposition de Cholesky :
Soit $A \in \mathcal{S}_n^{++}(\mathbb{R})$. Alors, il existe une unique matrice $B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ triangulaire inférieure de coefficients diagonaux strictement positifs telle que $A = B{}^tB$.

Démonstration.
• **Existence :** Comme A est symétrique définie positive alors elle admet une unique $A = LU$. En effet, si Δ_k n'est pas inversible alors il existe $Y \in \mathbb{R}^k$ non nul tel que $\Delta_k Y = 0$. Posons $X = (y_1, \dots, y_k, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^n$. Alors,

$$\langle AX \mid X \rangle = \sum_{i,j \in [\![1,n]\!]} a_{i,j} x_i x_j = \sum_{i,j \in [\![1,k]\!]} a_{i,j} y_i y_j = \langle \Delta_k Y \mid Y \rangle = 0$$

Ce qui est impossible car X est non nul et A est définie positive.
On note $U = (u_{i,j})_{i,j \in [\![1,n]\!]}$ et $D = \mathrm{diag}(\sqrt{u_{1,1}}, \dots, \sqrt{u_{n,n}})$.
On peut prendre la racine carrée car d'après la démonstration précédente, on a $\forall k \in [\![1,n]\!]$, $U_{1,1}^{(k)} = (L_{1,1}^{(k)})^{-1}\Delta_k$ donc $\forall k \in [\![1,n]\!]$, $\prod_{i=1}^{k} u_{i,i} = \det \Delta_k > 0$ alors $u_{k,k} > 0$.
On pose $B = LD$ et $C = D^{-1}U$. Comme $A \in \mathcal{S}_n^{++}(\mathbb{R})$ alors $BC = A = {}^tA = {}^tC{}^tB$ ou encore $C({}^tB)^{-1} = B^{-1}({}^tC)$. Comme C et ${}^tB$ sont triangulaires supérieures alors $C({}^tB)^{-1}$ aussi et de même $B^{-1}({}^tC)$ est triangulaire supérieure. Par l'égalité, elles sont toutes deux diagonales. Grâce à la définition de D, les matrices C et B ont les mêmes éléments diagonaux. Donc $C({}^tB)^{-1} = B^{-1}({}^tC) = I_n$. Donc $C = {}^tB$.

• **Unicité :** Supposons qu'il existe une autre décomposition $A = B{}^tB = B_1{}^tB_1$. De même $B_1^{-1}B = {}^tB_1{}^tB^{-1} = D$ diagonale (triangulaire supérieure et inférieure).
Donc $B{}^tB = BD{}^tD{}^tB = B(D^2){}^tB$ et comme B est inversible alors $D^2 = I_n$. Ainsi, les coefficients diagonaux de D sont égaux à ± 1. Mais, comme les coefficients de B sont positifs alors $D = I_n$. D'où l'unicité. □

Remarque.

- Ces deux décompositions sont utiles pour résoudre les systèmes linéaires de la forme $Ax = b$ avec $A \in GL_n(\mathbb{R})$. On a plus qu'à résoudre deux systèmes linéaires avec des matrices triangulaires (facile à résoudre avec méthodes de remontée et descente).
- En pratique, pour faire la décomposition de Cholesky d'une matrice A, on construit $B = (b_{i,j})_{i,j \in [\![1,n]\!]}$ telle que $\forall i, j \in [\![1,n]\!]$, $a_{i,j} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} b_{i,k} b_{j,k}$. Donc $b_{i,i} = \sqrt{a_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{i,k}^2}$ et comme A est symétrique alors $\forall j \in [\![i+1,n]\!]$, $b_{i,j} = \dfrac{1}{b_{i,i}} \left(a_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{i,k} b_{j,k} \right)$.
- La décomposition de Cholesky remplace avantageusement la décomposition LU pour une matrice symétrique définie positive car on fait environ 2 fois moins d'opérations.