GIS3 — Calcul Numérique — Épreuve de juin 2013
Durée 2 heures — Aucun document autorisé

---

1 Petits exercices et questions de cours (10 points)

Question 1 [2 pts]. Appliquer l'algorithme de Cholesky à la matrice A suivante. Expliquer en quelques mots la factorisation de A ainsi obtenue.

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & 6 \\ -2 & 17 & 13 \\ 6 & 13 & 61 \end{pmatrix}.$$

Question 2 [2 pts]. Résoudre le système d'équations linéaires $A\,x = b$ suivant, en utilisant le fait que la matrice A est factorisée. Expliquer en quelques mots la démarche avant de mener les calculs.

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 22 \end{pmatrix}.$$

Question 3 [2 pts]. On cherche à faire passer une droite d'équation $y = a\,x + b$ au plus près (au sens des moindres carrés) des trois points suivants :

$$(x_i,\, y_i) = (1, 1.1),\ (2.1, 1.95),\ (2.9,\, 3)\,.$$

Donner le système d'équations surdéterminé associé à ce problème.

Question 4 [1 pt]. Citer une méthode permettant de résoudre un système d'équations surdéterminé, au sens des moindres carrés.

Question 5 [1 pt]. Citer une méthode permettant de calculer un vecteur propre d'une matrice, connaissant la valeur propre.

Question 6 [1 pt]. Donner le pseudo-code de l'algorithme $Q\,R$ naïf.

Question 7 [1 pt]. L'algorithme $Q\,R$ permet de calculer une certaine factorisation d'une matrice A. Quelle factorisation ? Préciser la nature des facteurs.

2 Programmation FORTRAN (4 points)

Question 8 [4 pts]. Écrire une action (ou une fonction) FORTRAN qui calcule le produit scalaire de deux vecteurs v et w de dimension m (sans utiliser les BLAS), en double précision.

- Préciser les numéros de colonne qui ont une importance.
- Écrire dans des commentaires FORTRAN les spécifications de l'action (ou de la fonction) : paramètres en donnée ou en résultat, relations entre les paramètres, etc.

3 Problème (7 points)

Les questions qui suivent s'appliquent au document préparatoire ci-joint.

Question 9 [1 pt]. Page 2, il est écrit « Le passage de (3) à (4) s'appuie sur un raisonnement tenu lors de l'étude de l'itération inverse ». Préciser ce raisonnement.

Question 10 [2 pts]. Dans le premier paragraphe de description de l'algorithme, il est question des réflexions de Householder. Expliquer comment on construit une matrice de réflexion de Householder. Dans quel(s) algorithme(s) vus en cours les rencontre-t-on ?

Question 11 [3 pts]. Expliquer le principe de l'algorithme de mise sous forme bidiagonale. Votre explication ne devrait pas dépasser une demi-page (une page si vous faites des dessins). Préciser l'ordre dans lequel les opérations doivent être faites si vous pensez qu'il est important.

Question 12 [1 pt]. Lorsqu'on a étudié l'algorithme $Q\,R$, on a vu qu'il était possible de commencer par mettre les matrices symétriques sous forme tridiagonale. Pourquoi ne pas utiliser un algorithme de mise sous forme bidiagonale à la place ?

Polytech'Lille — GIS 3 — Calcul Numérique
La décomposition en valeur singulières

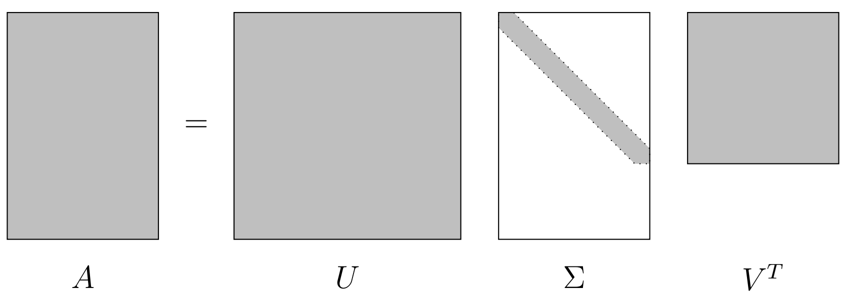
Le texte qui suit constitue une préparation au sujet d'examen. Les questions posées lors de l'examen consisteront à faire des rapprochements entre certaines affirmations du texte et des points de cours. Ces questions sont plus ou moins suggérées dans le texte lui-même. Il est conseillé de réfléchir à la méthode de mise sous forme bidiagonale avant l'examen.

Définition et théorème

Soit A une matrice réelle quelconque de dimension $m \times n$. La *décomposition en valeurs singulières* (en Anglais, *singular value decomposition*, ou *SVD*) de A est une factorisation de la forme

$$A \;=\; U\,\Sigma\,V^T\,, \tag{1}$$

où U, de dimension $m \times m$, et V, de dimension $n \times n$, sont deux matrices orthogonales [1] et Σ est une matrice $m \times n$ dont les seuls éléments non nuls sont sur la diagonale. Graphiquement :



Les éléments diagonaux de Σ sont les *valeurs singulières* $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n$ de la matrice A. Ce sont des réels positifs ou nuls. Il existe une relation forte entre les valeurs singulières de A et les valeurs propres de $A^T\,A$ [2, Theorem 5.4] :

Théorème 1 *Les valeurs singulières non nulles de A sont les racines carrées des valeurs propres non nulles de $A^T\,A$.*

Pour simplifier, on suppose que que A est plus haute que large ($m \geq n$) et de rang maximal, c'est-à-dire de rang n, comme dans certains problèmes étudiés en cours. Dans ce cas, on peut montrer que toutes les valeurs propres de $A^T\,A$ sont strictement positives [2].

---

1. Pour des raisons de simplicité, on a simplifié la vraie formule. En toute généralité, en effet, les matrices U et V peuvent être complexes et il faudrait généraliser la notion d'orthogonalité ainsi que l'opération de transposée au cas complexe. Par contre, les valeurs singulières sont toujours des réels positifs ou nuls. Voir [2, Lecture 4].
2. Preuve : d'après la proposition 14 du support de cours, $A^T\,A$ est définie positive : quel que soit le vecteur x non nul, $x^T\,A^T\,A\,x > 0$. Dans le cas d'un vecteur propre, $x^T\,A^T\,A\,x = \lambda\,x^T\,x$. Comme $x^T\,x > 0$, la valeur propre $\lambda > 0$.

Lien avec l'analyse en composantes principales

La décomposition en valeurs singulières de A est fortement liée à l'analyse en composantes principales de A. Supposons que, pour chaque colonne de A, la moyenne des éléments de la colonne soit nulle [3]. Alors, la matrice de covariance de A, notée cov_A, s'obtient par la formule :

$$cov_A \;=\; \frac{1}{n-1}\,A^T\,A\,. \tag{2}$$

Les valeurs propres de cov_A (qui jouent un rôle important dans l'analyse en composantes principales de A) s'obtiennent en divisant les valeurs propres de $A^T\,A$ par $n-1$, c'est-à-dire en divisant les carrés des valeurs singulières de A par $n-1$. Notons $\sigma(M)$ l'ensemble des valeurs singulières d'une matrice M et $\lambda(M)$ l'ensemble de ses valeurs propres (sous réserve que M soit carrée). On a :

$$\begin{aligned}
\lambda\,(cov_A) \;&=\; \lambda\left(\frac{1}{n-1}\,A^T\,A\right) && (3)\\
&=\; \frac{1}{n-1}\,\lambda\left(A^T\,A\right) && (4)\\
&=\; \frac{1}{n-1}\,\sigma\,(A)^2\,. && (5)
\end{aligned}$$

Le passage de (4) à (5) découle du théorème 1. Le passage de (3) à (4) s'appuie sur un raisonnement tenu lors de l'étude de l'itération inverse. On dispose donc de deux méthodes pour calculer les valeurs propres de cov_A :

1. en calculant les valeurs propres de $A^T\,A$,
2. en calculant les valeurs singulières de A, sans former explicitement la matrice $A^T\,A$.

La première (souvent utilisée en statistiques) est instable [2, Lecture 31]. On donne ci-dessous quelques détails sur la méthode directe.

Algorithme

On ne change pas les valeurs singulières d'une matrice si on la multiplie, à gauche ou à droite, par une matrice orthogonale quelconque [4]. Dans un premier temps, en multipliant A, tantôt à gauche, tantôt à droite, par des matrices orthogonales construites avec la technique des réflexions de Householder, on transforme cette matrice en une matrice B, ayant mêmes

3. Cela revient à supposer que A est une matrice de données centrées.

4. Cela découle de la définition des valeurs singulières d'une matrice A par la relation (1), et de l'unicité des valeurs singulières de A [2, Theorem 4.1].

valeurs singulières que A, mais sous forme *bidiagonale* :

$$B = \begin{pmatrix} \times & \times & & \\ & \times & \times & \\ & & \times & \times \\ & & & \times \\ & & & \\ & & & \end{pmatrix}.$$

Dans un deuxième temps, on supprime les lignes identiquement nulles de B, qui devient alors carrée, de dimension $n \times n$, et on calcule les valeurs propres de la matrice

$$\tilde{B} = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix}$$

qui est de dimension $(2\,n) \times (2\,n)$. On peut montrer que ces valeurs propres sont les valeurs singulières que l'on cherche. On peut utiliser un algorithme simple et efficace pour mettre $\tilde{B}$ sous une forme tridiagonale. Cette forme est d'ailleurs très particulière : la diagonale principale est nulle. Voir [1, pages 212-213].

Exemple

```
> with (LinearAlgebra):
> A := <<167, 157, 161, 163> |
        <-155, -169, -167, -157> |
        <-85, -77, -73, -89>>;
                                [167    -155    -85]
                                [                  ]
                                [157    -169    -77]
                           A := [                  ]
                                [161    -167    -73]
                                [                  ]
                                [163    -157    -89]
> SingularValues (A);
                                     [  0]
                                     [   ]
                                     [  6]
                                     [   ]
                                     [486]
                                     [   ]
                                     [ 18]

# Pour avoir la factorisation A = U . Sigma . V**T
> SingularValues (A, output = ['U', 'S', 'Vt']);


# Après bidiagonalisation, on obtient une matrice B bidiagonale,
# ayant mêmes valeurs singulières que A
```

```
                    [-324.0802369    -362.0099093         0.     ]
                    [                                            ]
                    [     0.         -14.49975677    -11.90870987]
               B := [                                            ]
                    [     0.              0.         -11.16983506]
                    [                                            ]
                    [     0.              0.              0.     ]

Btilde := <<       Matrix (3,3)        |   B [1..3,1..3] >,
           < Transpose (B [1..3,1..3]) |   Matrix (3,3) >>;

                      [0 , 0 , 0 , -324.0802369 , -362.0099093 , 0.]
                      [                                             ]
                      [0 , 0 , 0 , 0. , -14.49975677 , -11.90870987]
                      [                                             ]
                      [0 ,   0 ,   0 ,   0. ,   0. ,   -11.16983506]
           Btilde :=  [                                             ]
                      [-324.0802369 ,   0. ,   0. ,   0 ,   0 ,   0]
                      [                                             ]
                      [-362.0099093 , -14.49975677 , 0. , 0 , 0 , 0]
                      [                                             ]
                      [0. , -11.90870987 , -11.16983506 , 0 , 0 , 0]

# Les valeurs propres de Btilde sont les valeurs singulières recherchées
> Eigenvalues (Btilde);
                           [485.999999910402 + 0. I ]
                           [                        ]
                           [-485.999999910402 + 0. I]
                           [                        ]
                           [18.0000000010247 + 0. I ]
                           [                        ]
                           [-18.0000000010247 + 0. I]
                           [                        ]
                           [6.00000000255593 + 0. I ]
                           [                        ]
                           [-6.00000000255593 + 0. I]
```

Références

[1] G. Golub and W. Kahan. Calculating the Singular Values and Pseudo-Inverse of a Matrix. *J. SIAM Numer. Anal.*, 2(2), 1965.

[2] Lloyd Nicholas Trefethen and David Bau. *Numerical Linear Algebra.* SIAM, 1997.