C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 349 (2011) 1293–1296

Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I

www.sciencedirect.com

Analyse numérique

Sur l'usage de la formule de Cauchy–Binet dans les démonstrations de convergence de l'algorithme QR tri-diagonal avec décalages

Using the Cauchy–Binet formula in the convergence proof of the tridiagonal QR algorithm with shifts

Michel Cuer

Institut de mathématiques et de modélisation de Montpellier, CNRS UMR 5149, équipe ACSIOM, université Montpellier 2, case courrier 051, 34095 Montpellier cedex 5, France

INFO ARTICLE

Historique de l'article :
Reçu le 20 juillet 2011
Accepté après révision le 27 octobre 2011
Disponible sur Internet le 9 novembre 2011

Présenté par Philippe G. Ciarlet

RÉSUMÉ

Au moyen de la formule de Cauchy–Binet, on montre qu'il est possible de simplifier les preuves de convergence de l'algorithme QR tri-diagonal avec décalages dues à Wilkinson (1968) [12], Hoffmann–Parlett (1978, 1998) [3,7] et Jiang–Zhang (1985) [4], y compris les résultats de convergence quadratique ou cubique.

ABSTRACT

Using the Cauchy–Binet formula, one shows that it is possible to simplify the convergence proofs of the tridiagonal QR algorithm with shifts due to Wilkinson (1968) [12], Hoffmann–Parlett (1978, 1998) [3,7], and Jiang–Zhang (1985) [4], including the quadratic or cubic convergence results.

1. Introduction

Une forme simplifiée de l'algorithme QR (avec décalages) de calcul des valeurs propres d'une matrice complexe $n \times n$, après réduction de cette matrice à la forme de Hessenberg supérieure :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & h_{1,2} & h_{1,3} & \cdots & h_{1,n} \\ \beta_1 & \alpha_2 & h_{2,3} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & h_{n-2,n} \\ \vdots & \ddots & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & h_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & 0 & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}, \tag{1}$$

qu'on peut toujours supposer non réduite ($\beta_i \neq 0$, $1 \leqslant i \leqslant n-1$), consiste à engendrer une suite de matrices $\{\mathbf{H}^{(k)}\}_{k \geqslant 0}$ de Hessenberg supérieures non réduites, avec des décalages $\{\lambda^{(k)}\}_{k \geqslant 0}$ appropriés, telle que, $\mathbf{I}$ étant la matrice identité $n \times n$,

Adresses e-mail : michel.cuer@univ-montp2.fr, mcuer@free.fr.

1631-073X/$ – see front matter
doi:10.1016/j.crma.2011.10.026

$\mathbf{H}^{(0)}=\mathbf{H}$, et « pour $k=0,1,\ldots,$ $\mathbf{H}^{(k)}-\lambda^{(k)}\mathbf{I}=\mathbf{Q}^{(k)}\mathbf{R}^{(k)}$ est la factorisation QR de $\mathbf{H}^{(k)}-\lambda^{(k)}\mathbf{I}$ et $\mathbf{H}^{(k+1)}=\mathbf{R}^{(k)}\mathbf{Q}^{(k)}+\lambda^{(k)}\mathbf{I}=\mathbf{Q}^{(k)^*}\mathbf{H}^{(k)}\mathbf{Q}^{(k)}$ ». Les décalages $\lambda^{(k)}$ sont choisis pour que $\beta_{n-1}^{(k)}\to_{k\to\infty}0$ très rapidement et ayant obtenu $\beta_{n-1}^{(k)}\cong 0$, en quelques itérations, par déflation on calcule de proche en proche toutes les valeurs propres (voir [1,2,8,11] ainsi que [9,10]). Il n'existe de démonstration de convergence globale de ces algorithmes avec décalages, avec des choix de décalages « sûrs », que dans le cas hermitien (matrices $\mathbf{H}^{(k)}$ tridiagonales hermitiennes) [12,3,7,4]. On peut toujours supposer $\mathbf{H}^{(k)}-\lambda^{(k)}\mathbf{I}$ inversible (car sinon $\beta_{n-1}^{(k+1)}=0$, voir [7, p. 161, exercice 8.7.6]), et alors la matrice $\mathbf{R}^{(k)}$ est définie de manière unique par la condition $r_{i,i}^{(k)}>0$ (voir [1, p. 92, théorème 4.5.2]). Dans la suite on omet l'indice k et on utilise le symbole ˆ pour signifier l'itération $k+1$: par exemple $\beta_j=\beta_j^{(k)}(\lambda^{(k)})$, $\hat\beta_j=\beta_j^{(k+1)}(\lambda^{(k)})$. Notant $\mathbf{H}_j=\mathbf{H}_j(\lambda)$ la $j$ième colonne de $\mathbf{H}(\lambda)=\mathbf{H}-\lambda\mathbf{I}=\mathbf{QR}$, on rappelle l'expression des colonnes $\mathbf{Q}_j=\mathbf{Q}_j(\lambda)$ de $\mathbf{Q}=\mathbf{Q}(\lambda)$ en termes de déterminants de Gram (qui a été utilisée dans la preuve de convergence de l'algorithme sans décalage de [5,6]) :

$$\mathbf{Q}_j=\frac{1}{\sqrt{\gamma_j\gamma_{j-1}}}\det\begin{pmatrix}\mathbf{H}_1^*\mathbf{H}_1 & \cdots & \mathbf{H}_1^*\mathbf{H}_j\\ \vdots & & \vdots\\ \mathbf{H}_{j-1}^*\mathbf{H}_1 & \cdots & \mathbf{H}_{j-1}^*\mathbf{H}_j\\ \mathbf{H}_1 & \cdots & \mathbf{H}_j\end{pmatrix}\quad \text{où } \gamma_k=\gamma_k(\lambda)=\det\begin{pmatrix}\mathbf{H}_1^*\mathbf{H}_1 & \cdots & \mathbf{H}_1^*\mathbf{H}_k\\ \vdots & & \vdots\\ \mathbf{H}_k^*\mathbf{H}_1 & \cdots & \mathbf{H}_k^*\mathbf{H}_k\end{pmatrix}$$

pour $1\leqslant k\leqslant n$ et $\gamma_0=1$. On y lit les coefficients de l'inverse $\mathbf{R}^{-1}$ de la matrice $\mathbf{R}=\mathbf{R}(\lambda)$, en particulier $r_{j,j}=\sqrt{\frac{\gamma_j}{\gamma_{j-1}}}$ et $\mathbf{H}^{(k+1)}=\mathbf{R}^{(k)}\mathbf{Q}^{(k)}+\lambda^{(k)}\mathbf{I}=\mathbf{R}^{(k)}(\mathbf{H}^{(k)}-\lambda^{(k)}\mathbf{I})\mathbf{R}^{(k)^{-1}}+\lambda^{(k)}\mathbf{I}$ donne $\hat\beta_{j-1}=\frac{\sqrt{\gamma_j\gamma_{j-2}}}{\gamma_{j-1}}\beta_{j-1}$. On rappelle également qu'étant données deux matrices $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}$ de tailles respectives $k\times m$ et $m\times k$ (avec $m\geqslant k$) la formule de Cauchy–Binet est $\det(\mathbf{BC})=\sum_J\det(\mathbf{B}(J))\det(\mathbf{C}(J))$ où la somme est faite sur les $C_m^k=\frac{m!}{k!(m-k)!}$ ensembles de k-uplets d'entiers $J=(j_1,j_2,\ldots,j_k)$ tels que $1\leqslant j_1<j_2<\cdots<j_k\leqslant m$, $\mathbf{B}(J)$ étant la matrice $k\times k$ obtenue en choisissant les colonnes de $\mathbf{B}$ d'indices $j\in J$ et en procédant pour $\mathbf{C}(J)$ de façon analogue mais en extrayant des lignes de $\mathbf{C}$ (voir par exemple http://www.math.washington.edu/~morrow/335_11/CauchyBinet1.pdf). Si $\mathbf{H}_{1:i}$ est la matrice $n\times i$ obtenue en extrayant les i premières colonnes de $\mathbf{H}(\lambda)$, on a $\gamma_i=\det(\mathbf{H}_{1:i}^*\mathbf{H}_{1:i})$ et l'application de la formule de Cauchy–Binet, compte tenu de la forme de Hessenberg supérieure de $\mathbf{H}$ montre que γ_i est une somme de $i+1$ termes seulement où n'apparaissent que les β_j et les déterminants principaux $\delta_j=\delta_j(\lambda)$ de $\mathbf{H}(\lambda)$. Finalement, après un calcul classique des déterminants δ_j (où $\delta_1=\alpha_1-\lambda$), on peut écrire, en convenant de $\gamma_0=1$, $\beta_n=0$ (si bien que $\gamma_n=|\delta_n|^2$) et $\delta_0=1$, la dernière formule devenant $\delta_i=(\alpha_i-\lambda)\delta_{i-1}-|\beta_{i-1}|^2\delta_{i-2}=((\alpha_i-\lambda)(\alpha_{i-1}-\lambda)-|\beta_{i-1}|^2)\delta_{i-2}-(\alpha_i-\lambda)|\beta_{i-2}|^2\delta_{i-3}$ dans le cas hermitien :

$$\hat\beta_{j-1}=\frac{\sqrt{\gamma_j\gamma_{j-2}}}{\gamma_{j-1}}\beta_{j-1},\quad 2\leqslant j\leqslant n, \tag{2}$$

$$\gamma_i=\sum_{j=0}^{i-1}|\beta_{j+1}|^2|\beta_{j+2}|^2\cdots|\beta_i|^2|\delta_j|^2+|\delta_i|^2=|\beta_i|^2\gamma_{i-1}+|\delta_i|^2,\quad 1\leqslant i\leqslant n, \tag{3}$$

$$\delta_i=(\alpha_i-\lambda)\delta_{i-1}+\sum_{j=0}^{i-2}(-1)^{i-1-j}\beta_{i-1}\beta_{i-2}\cdots\beta_{j+1}h_{j+1,i}\delta_j,\quad 2\leqslant i\leqslant n. \tag{4}$$

2. La preuve de Wilkinson

Dans le cas du décalage de Rayleigh $\lambda^{(k)}=\alpha_n^{(k)}=\alpha_n$, $\delta_n(=\delta_n^{(k)})=-|\beta_{n-1}|^2\delta_{n-2}$ et (2) et (3) donnent

$$|\hat\beta_{n-1}|=\frac{|\beta_{n-1}|^2|\delta_{n-2}|\sqrt{\gamma_{n-2}}}{\gamma_{n-1}}|\beta_{n-1}|\leqslant\frac{|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2}}{|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2}+|\delta_{n-1}|^2}|\beta_{n-1}|\leqslant|\beta_{n-1}|;$$

ainsi la suite $\{|\beta_{n-1}^{(k)}|\}_{k\geqslant 0}$ converge et si sa limite est zéro, ce qui n'est pas toujours le cas, la convergence est cubique. Dans le cas du décalage de Wilkinson $(\alpha_n-\lambda^{(k)})(\alpha_{n-1}-\lambda^{(k)})-|\beta_{n-1}|^2=0$ avec $|\alpha_n-\lambda^{(k)}|\leqslant|\alpha_{n-1}-\lambda^{(k)}|$ d'où $|\alpha_n-\lambda^{(k)}|\leqslant|\beta_{n-1}|$ et $\delta_n=-(\alpha_n-\lambda^{(k)})|\beta_{n-2}|^2\delta_{n-3}$ et (2) et (3) donnent

$$|\hat\beta_{n-1}|\leqslant\frac{|\beta_{n-1}||\beta_{n-2}|^2|\delta_{n-3}|\sqrt{\gamma_{n-2}}}{\gamma_{n-1}}|\beta_{n-1}|\leqslant\frac{|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2}}{|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2}+|\delta_{n-1}|^2}|\beta_{n-2}|\leqslant|\beta_{n-2}|\quad\text{et aussi}$$

$$|\hat\beta_{n-1}\hat\beta_{n-2}|=\frac{\sqrt{\gamma_n\gamma_{n-3}}}{\sqrt{\gamma_{n-1}\gamma_{n-2}}}|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|=\frac{|\delta_n|\sqrt{\gamma_{n-3}}}{\sqrt{\gamma_{n-1}\gamma_{n-2}}}|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|\leqslant\frac{|\beta_{n-1}||\beta_{n-2}|^2|\delta_{n-3}|\sqrt{\gamma_{n-3}}}{\sqrt{(|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2}+|\delta_{n-1}|^2)\gamma_{n-2}}}|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|$$

$$\leqslant\frac{|\beta_{n-1}||\beta_{n-2}|^2\gamma_{n-3}}{\sqrt{(|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2}+|\delta_{n-1}|^2)\gamma_{n-2}}}|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|\leqslant\frac{|\beta_{n-1}|\gamma_{n-2}}{\sqrt{|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2}^2+|\delta_{n-1}|^2\gamma_{n-2}}}|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|\leqslant|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|;$$

ainsi la suite $\{|\beta_{n-1}^{(k)}\beta_{n-2}^{(k)}|\}_{k\geqslant 0}$ converge et sa limite est zéro (sinon, comme en [12], on montrerait, après éventuellement extraction de sous suites, que ($\delta_{n-1}^{(k)} \rightarrow_{k\to\infty} 0$ ou $\delta_{n-3}^{(k)} \rightarrow_{k\to\infty} 0$) et $\delta_{n-2}^{(k)} \rightarrow_{k\to\infty} 0$ ce qui est absurde car les valeurs propres d'une matrice tri-diagonale hermitienne non réduite sont distinctes) d'où $\beta_{n-1}^{(k)} \rightarrow_{k\to\infty} 0$ ou $\beta_{n-2}^{(k)} \rightarrow_{k\to\infty} 0$ mais dans ce dernier cas on a aussi $\beta_{n-1}^{(k)} \rightarrow_{k\to\infty} 0$ puisque $|\beta_{n-1}^{(k+1)}| \leqslant |\beta_{n-2}^{(k)}|$. Enfin,

$$|\delta_n| = \left|-\left(\alpha_n - \lambda^{(k)}\right)|\beta_{n-2}|^2\delta_{n-3}\right| \begin{cases} \leqslant |\beta_{n-1}||\beta_{n-2}|^2\delta_{n-3}| \\ = \frac{|\beta_{n-1}|^2}{|\alpha_{n-1}-\lambda^{(k)}|}|\beta_{n-2}|^2\delta_{n-3}| \end{cases}, \quad \left|\hat{\beta}_{n-1}\right| = \frac{|\delta_n|\sqrt{\gamma_{n-2}}}{\gamma_{n-1}}|\beta_{n-1}|$$

montrent que la convergence est toujours quadratique et qu'elle est cubique si $|\alpha_{n-1} - \lambda^{(k)}|$ reste minoré par une constante non nulle.

3. La preuve de Hoffmann et Parlett

On reste dans le cas du décalage de Wilkinson et on montre d'abord que $|\hat{\beta}_{n-1}| \leqslant \sqrt{\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}}}$ et $\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}} \leqslant \min(|\beta_{n-2}|^2, 2|\beta_{n-1}|, \frac{|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|}{\sqrt{2}})$. On peut écrire

$$\left|\hat{\beta}_{n-1}\right| = \frac{\sqrt{\gamma_n}}{\sqrt{\gamma_{n-1}}} \underbrace{\frac{|\beta_{n-1}|\sqrt{\gamma_{n-2}}}{\sqrt{\gamma_{n-1}}}}_{\leqslant 1} \leqslant \sqrt{\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}}}, \quad \text{et}$$

$$\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}} \leqslant \frac{(|\beta_{n-1}||\beta_{n-2}|^2|\delta_{n-3}|)^2}{|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2} + |\delta_{n-1}|^2} \leqslant \frac{|\beta_{n-1}|^2|\beta_{n-2}|^2\gamma_{n-2}}{|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2} + |\delta_{n-1}|^2} \leqslant |\beta_{n-2}|^2$$

et comme $\delta_n = (\alpha_n - \lambda^{(k)})\delta_{n-1} - |\beta_{n-1}|^2\delta_{n-2}$ et $|\alpha_n - \lambda^{(k)}| \leqslant |\beta_{n-1}|$ on a aussi $|\delta_n| \leqslant |\beta_{n-1}||\delta_{n-1}| + |\beta_{n-1}|^2|\delta_{n-2}|$ donc $|\delta_n|^2 \leqslant 2|\beta_{n-1}|^2(|\delta_{n-1}|^2 + |\beta_{n-1}|^2|\delta_{n-2}|^2)$ et il vient $\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}} \leqslant \frac{2|\beta_{n-1}|^2(|\beta_{n-1}|^2|\delta_{n-2}|^2+|\delta_{n-1}|^2)}{|\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2}+|\delta_{n-1}|^2} \leqslant 2|\beta_{n-1}|^2$ car $|\delta_{n-2}|^2 \leqslant \gamma_{n-2}$. Enfin

$$\begin{aligned} \gamma_{n-1} &= |\beta_{n-1}|^2\gamma_{n-2} + |\delta_{n-1}|^2 = |\beta_{n-1}|^2\left(|\beta_{n-2}|^2\gamma_{n-3} + |\delta_{n-2}|^2\right) + |\delta_{n-1}|^2 \\ &\geqslant |\beta_{n-1}|^2|\beta_{n-2}|^2|\delta_{n-3}|^2 + |\beta_{n-1}|^2|\delta_{n-2}|^2 + |\delta_{n-1}|^2 \geqslant \frac{|\delta_n|^2}{|\beta_{n-2}|^2} + \frac{|\delta_n|^2}{2|\beta_{n-1}|^2} \end{aligned}$$

montre que

$$\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}} \leqslant \frac{1}{\frac{1}{|\beta_{n-2}|^2} + \frac{1}{2|\beta_{n-1}|^2}} \leqslant \frac{1}{\frac{2}{\sqrt{2}|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|}} = \frac{|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|}{\sqrt{2}}.$$

On établit ensuite

$$\left|\hat{\beta}_{n-1}\hat{\beta}_{n-2}\right| = \frac{\sqrt{\gamma_n\gamma_{n-2}}}{\gamma_{n-1}}\frac{\sqrt{\gamma_{n-1}\gamma_{n-3}}}{\gamma_{n-2}}|\beta_{n-1}\beta_{n-2}| = \sqrt{\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}}}|\beta_{n-1}|\underbrace{\frac{|\beta_{n-2}|\sqrt{\gamma_{n-3}}}{\sqrt{\gamma_{n-2}}}}_{\leqslant 1} \leqslant \sqrt{\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}}}|\beta_{n-1}|,$$

$$\left|\hat{\beta}_{n-1}\right|^3 \leqslant \sqrt{\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}}}\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}} \leqslant \sqrt{2}|\beta_{n-1}|\frac{|\beta_{n-1}\beta_{n-2}|}{\sqrt{2}} = |\beta_{n-1}|^2|\beta_{n-2}|$$

et la convergence se déduit de

$$\left|\hat{\beta}_{n-1}\right|^2\left|\hat{\beta}_{n-2}\right| \leqslant \sqrt{\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}}}\sqrt{\frac{\gamma_n}{\gamma_{n-1}}}|\beta_{n-1}| \leqslant \frac{|\beta_{n-1}|^2|\beta_{n-2}|}{\sqrt{2}}.$$

On peut traiter de façon analogue le décalage de Jiang et Zhang [4] (on choisit pour $\lambda^{(k)}$ le décalage de Rayleigh si $|\beta_{n-2}|^2 \geqslant 2|\beta_{n-1}|^2$ et celui de Wilkinson sinon) qui donne un algorithme à convergence cubique dans tous les cas hermitiens. Enfin dans le cas non hermitien, s'il y a convergence avec le décalage de Wilkinson, (2), (3) et (4) montrent que la convergence est superlinéaire en général et quadratique si la matrice est normale. On obtient ainsi une présentation accessible dans les premières années de l'Université pouvant rendre compte au moins en partie des performances de l'algorithme qu'on peut observer en travaux pratiques par exemple en le programmant sous MATLAB. De plus il n'est pas impossible que les formules (2), (3), (4) soient utilisables dans le cadre des décalages multiples, mais il faut probablement ajouter de nouvelles idées.

Remerciements

Je remercie le rapporteur et B. Koobus pour ses encouragements. Je dédie ce travail à mes professeurs de mathématiques P.C. Sabatier et B. Lemaire.

Références

[1] P.G. Ciarlet, Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation, Masson, Paris, 1985.
[2] J.W. Demmel, Applied Numerical Linear Algebra, SIAM, Philadelphia, 1997.
[3] W. Hoffmann, B.N. Parlett, A new proof of global convergence for the tridiagonal QL algorithm, SIAM J. Numer. Anal. 15 (5) (1978) 929–937.
[4] E. Jiang, Z. Zhang, A new shift of the QL algorithm for irreductible symmetric tridiagonal matrices, Linear Algebra Appl. 65 (1985) 261–272.
[5] B. Parlett, Convergence of the QR algorithm, Numer. Math. 7 (1965) 187–193.
[6] B. Parlett, Correction to convergence of the QR algorithm, Numer. Math. 10 (1967) 163–164.
[7] B.N. Parlett, The Symmetric Eigenvalue Problem, SIAM, Philadelphia, 1998.
[8] G.W. Stewart, Matrix Algorithms, vol. II, Eigensystems, SIAM, Philadelphia, 2001.
[9] E.E. Tyrtyshnikov, Matrix Bruhat decomposition with a remark on the QR (GR) algorithm, Linear Algebra Appl. 250 (1997) 61–68.
[10] E.E. Tyrtyshnikov, On the convergence of the QR algorithm with multishifts, J. Math. Sci. 89 (6) (1998) 1768–1774.
[11] D.S. Watkins, The QR algorithm revisited, SIAM Rev. 50 (1) (2008) 133–145.
[12] J.H. Wilkinson, Global convergence of tridiagonal QR algorithm with origin shifts, Linear Algebra Appl. 1 (1968) 409–420.