

MÉMOIRES DE LA S. M. F.

JACQUES SCHLESINGER

PIERRE DUFOUR

GERARD VANDERBORG

MICHEL ERCULISSE

**Essai d'application de la méthode spectroscopique de
Lanczos pour la recherche des valeurs propres des matrices**

Mémoires de la S. M. F., tome 49-50 (1977), p. 181-185

http://www.numdam.org/item?id=MSMF_1977__49-50__181_0

© Mémoires de la S. M. F., 1977, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Mémoires de la S. M. F. » (<http://smf.emath.fr/Publications/Memoires/Presentation.html>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques

<http://www.numdam.org/>

ESSAI D'APPLICATION
DE LA METHODE SPECTROSCOPIQUE DE LANCZOS
POUR LA RECHERCHE DES VALEURS PROPRES
DES MATRICES

par Jacques SCHLESINGER, Pierre DUFOUR
Gérard VANDERBORG et Michel ERCULISSE

1.- INTRODUCTION

Dans son livre intitulé " Applied analysis ", (1) Lanczos a proposé en 1956 une méthode spectroscopique de recherches de valeurs propres utilisant la transformée de Fourier. A part Parker et Fox (2) qui la citent avec un exemple d'utilisation, personne ne semble avoir exploité cette méthode à ce jour. Elle présente cependant quelques attraits :

- Les grandes valeurs propres ne sont pas favorisées par rapport aux petites
- La méthode est valable aussi bien pour les matrices symétriques que pour les matrices non symétriques (pour autant que celles-ci aient des valeurs propres réelles)
- Lanczos affirme qu'au cours des calculs, les erreurs d'arrondi ne s'accumulent pas aussi dramatiquement que dans d'autres méthodes.

Finalement, il est aujourd'hui possible d'utiliser les programmes de transformées de Fourier rapides.

2.- LA METHODE DE LANCZOS (voir les détails dans réf. (2) pp. 190 et suivantes)

2.1.- Comme nous représenterons les valeurs propres des matrices comme arguments de polynômes de Chebyshev, il est nécessaire d'appliquer à la matrice de départ $B(n \times n)$ une transformation qui la change en une matrice A dont les valeurs propres sont comprises entre -1 et $+1$:

$$A = 2\left(\frac{B - \lambda \min}{\lambda \max - \lambda \min}\right) - 1 \quad (1)$$

Il est donc nécessaire à priori de connaître des bornes sur les valeurs propres \min et \max . Nous ne nous attarderons pas sur ce problème bien qu'il ne soit pas trivial et supposerons connus $\lambda \min$ et $\lambda \max$ par une méthode de Gersgorin ou par une autre méthode.

2.2.- Choisissons un vecteur aléatoire $\vec{z}^{(0)}$ (à n composantes). Si les vecteurs propres de A (\vec{x}^s) constituent une base de l'espace à n dimensions, on a :

$$\vec{z}^{(0)} = \sum_{s=1}^n \alpha_s \vec{x}^s \quad (2)$$

Si on applique à ce vecteur les relations de récurrence des polynômes de Chebyshev,

$$\begin{cases} \vec{z}(1) = A \vec{z}(0) \\ \vec{z}(r+1) = 2A \vec{z}(r) - \vec{z}(r-1) \end{cases} \quad (3)$$

on a : $\vec{z}(r) = T^{(r)}(A) \vec{z}(0)$ et donc :

$$\vec{z}(r) = \sum_{s=1}^n \alpha_s T^{(r)}(\lambda_s) \vec{x}^{(s)}$$

ou, avec $\lambda_s = \cos \theta_s$,

$$\vec{z}(r) = \sum_{s=1}^n \alpha_s \cos(r \theta_s) \vec{x}^{(s)}$$

Si on génère N vecteurs : $\vec{z}^{(i)}$ $i = 0 \dots N-1$, et qu'on prend la $j^{\text{ème}}$ composante de ces N vecteurs, on obtient N nombres qui évoluent comme une somme de cosinus.

Pour trouver les valeurs propres, il suffit maintenant de trouver les fréquences d'évolution d'une suite de N nombres. Ce problème peut être résolu par une méthode de transformée de Fourier finie :

$$Z(p) = 1/2 z_j^{(0)} + \sum_{\ell=1}^{n-1} z_j^{(\ell)} \cos \pi \frac{p\ell}{N} + 1/2 z_j^{(N)} \cos \pi p \quad (5)$$

Pour p entier, on a :

$$Z(p) = \frac{(-)^p}{4} \sum_{s=1}^n \alpha_s x_j^{(s)} \sin(N \theta_s) \left\{ \text{ctg } 1/2(\theta_s - \frac{\pi p}{N}) + \text{ctg } 1/2(\theta_s + \frac{\pi p}{N}) \right\} \quad (6)$$

avec $x_j^{(s)}$ $j^{\text{ème}}$ composante du $s^{\text{ème}}$ vecteur propre.

Pour N grand, on a en général :

$$Z(p) \times Z(p+1) < 0$$

La valeur propre θ_1 peut être écrite sous la forme

$$\theta_1 = \frac{\pi}{N}(k + \epsilon) \quad (0 \leq \epsilon < 1) \quad (7)$$

Si p est proche d'une valeur propre, le premier terme de (6) est dominant.

On a alors :

$$\begin{Bmatrix} Z_1(k-1) \\ Z_1(k) \\ Z_1(k+1) \\ Z_1(K+2) \end{Bmatrix} \approx \frac{(-)^{k-1}}{2} \sin(N \theta_1) \frac{N}{\pi} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{1+\epsilon} - \frac{1}{\epsilon} \\ -\frac{1}{1-\epsilon} \\ \frac{1}{2-\epsilon} \end{array} \right\} \quad (8)$$

On peut donc reconnaître les valeurs de k qui encadrent une valeur propre par le fait que Z_1 ne change pas de signe pour 2 valeurs de k successives.

Pour estimer ϵ , on commence par lisser les valeurs de Z .

$$Y(p) = Z(p-1) + 2 * Z(p) + Z(p+1) \quad (9)$$

et on a alors :

$$\epsilon = \frac{2 - \frac{Y_p(k)}{Y_p(k+1)}}{1 + \frac{Y_p(k)}{Y_p(k+1)}} \quad (10)$$

En introduisant la valeur de ϵ dans (7), on trouve donc θ_1 . La transformation inverse de (1) permet d'obtenir :

$$\lambda = \lambda_{\min} + \frac{(\cos(\theta_1) + 1)}{2} (\lambda_{\max} - \lambda_{\min}) \quad (11)$$

3. REMARQUES SUR LA METHODE

3.1.- Nous avons vu qu'il était nécessaire de connaître à priori des bornes sur les valeurs extrêmes des valeurs propres.

3.2.- Si la composante des vecteurs $\vec{z}^{(i)}$ qui a été choisie est à peu près perpendiculaire à un vecteur propre, on aura $x_j^{(s)}$ petit et la contribution de la fréquence correspondant à la valeur propre (s) sera très faible et risquera de passer inaperçue.

3.3.- Si θ_1 correspondant à une valeur propre est proche d'un multiple de $\frac{\pi}{N}$, la contribution de cette valeur propre sera faible à tous les points d'observation et elle risque aussi de passer inaperçue.

3.4.- Remarquons également que la transformation des θ , vers λ se fait par un cos et que les valeurs centrales seront donc déterminées avec moins de précision que les valeurs extrêmes.

4. AMELIORATIONS OFFERTES

Nous avons tenté d'améliorer la méthode en tenant compte des remarques 2.2. et 3.3.

4.1.- Au lieu de prendre une seule composante de $\vec{z}^{(l)}$, nous avons à chaque étape sommé toutes les composantes en les pondérant par l'inverse de la composante correspondante du vecteur aléatoire de départ.

De cette manière, nous atténuons le problème lié à l'orthogonalité d'un vecteur propre et de la composante choisie.

4.2.- Nous avons cherché un meilleur moyen de détecter les valeurs propres que celui basé sur l'alternance des signes. Nous avons remarqué que la valeur absolue de la fonction transformée varie très lentement et qu'elle présente un maximum à l'endroit des valeurs propres. Nous trouvons les valeurs propres en calculant $Y(p)$ pour tous les p et en cherchant les maxima significatifs de $Y(p)$.

5. RESULTATS

Nous avons testé la méthode de recherche des valeurs propres sur une collection de 22 matrices de type 3×3 à 14×14 tirés de (3).

Nous avons travaillé avec 1024 points et avons obtenu de très bons résultats (tabl. 1). Les valeurs propres ont été trouvées en un temps moyen inférieur à 5 sec. par matrice.

Cependant, lorsque deux valeurs propres sont trop proches, on en perd une des deux et l'autre est déterminée avec une moins bonne précision.

Cette méthode ne donne aucune indication sur le degré de multiplicité des valeurs propres. S'il n'y a qu'une valeur double, on peut la déterminer à l'aide de la trace de la matrice.

Il semble que pour les matrices non symétriques, on assiste parfois à un déroulement des valeurs propres simples.

TABLE 1

Pour les exemples 4.11 et 4.12 de la réf. (3), nous avons trouvé les valeurs propres suivantes que nous comparons à celles données par Grégory et Karney.

Exemple 4.11.- Matrice 11 × 11

| <u>Trouvés</u> | <u>Résultat Grégory-Karney</u> |
|----------------|--------------------------------|
| 0.52228220 | 0.52228228 |
| 1.80384758 | 1.80384757 |
| 3.17157311 | 3.17157287 |
| 3.99999434 | 4. (double) |
| 4.12912738 | 4.12924848 |
| 4.40664613 | 4.40664990 |
| 6.00000012 | 6. |
| 8.82842711 | 8.82842712 |
| 12.19615241 | 12.19615242 |
| 14.94181932 | 14.94181932 |

$$\text{Tr} - \sum \lambda_i = 4.00013025$$

Exemple 4.12.- Matrice 14 x 14

| <u>Trouvés</u> | <u>Résultat Gregory-Karney</u> |
|----------------|--------------------------------|
| 0.06427006 | 0.06437991 |
| 0.07359796 | 0.07359712 |
| 0.08422453 | 0.08422527 |
| 0.09720180 | 0.09720921 |
| 0.10320991 | 0.10321576 |
| 0.12279457 | 0.12278752 |
| 0.14342191 | 0.14342288 |
| 0.16642620 | 0.16632460 |
| 0.17114912 | 0.17130756 |
| 0.17735078 | 0.17735633 |
| 0.23164036 | 0.23163942 |
| 0.26773327 | 0.26773329 |
| 0.46276620 | 0.46276620 |
| 1.33403484 | 1.33403484 |

REFERENCES

=====

- (1) LANCZOS C.- " Applied analysis ".- Prentice Hall 1956.
 (2) PARKER et FOX.- " Chebyshev Polynomials in numerical analysis ".- Oxford University Press, 1968.
 (3) R.T. GREGORY et D.L. KARNEY.- " A collection of matrices for testing computial algorithms ". Wiley (1969).

Jacques Schlesinger, Gérard Vanderborg,
 et Michel Erculisse
 Faculté des Sciences
 Avenue Maistriau
 Université de l'Etat
 B-7000 MONS Belgique

Pierre Dufour
 Centre de Calcul et d'informatique
 Place Warocqué
 Université de l'Etat
 B-7000 MONS Belgique