Aplicații la algoritmul de ortogonalizare Gram-Schmidt

1. Descompunerea QR asociată unei matrici

Fie $m, n \in \mathbb{N}^*$, $m \geq n$ și $A \in \mathcal{M}_{m,n}(\mathbb{R})$ o matrice cu rang $A = n$.

Notăm cu $e_1, \dots, e_n \in \mathbb{R}^m$ vectorii coloană ai matricii A.

Atunci rang $A = n \Leftrightarrow e_1, \dots, e_n$ sunt liniar independenți.

Pe $\mathbb{R}^m$ considerăm produsul scalar standard, dat de formula:

$$\Big\langle \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}}_{x}, \underbrace{\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}}_{y} \Big\rangle = \sum_{i=1}^{m} x_i \cdot y_i = x^t \cdot y$$

Prin procedeul de ortogonalizare Gram-Schmidt, pornind de la vectorii $e_1, \dots, e_n$, se obține un sistem de vectori ortogonali doi câte doi $u_1, \dots, u_n \in \mathbb{R}^n$, astfel încât pentru orice $k = \overline{1,n}$, $Sp\{e_1, \dots, e_k\} = Sp\{u_1, \dots, u_k\}$, prin formulele:

$$(1) \begin{cases} u_1 = e_1 \\ u_k = e_k - \sum_{j=1}^{k-1} pr_{u_j} e_k = e_k - \sum_{j=1}^{k-1} \dfrac{\langle e_k, u_j \rangle}{\langle u_j, u_j \rangle} u_j, \quad k = \overline{2,n} \end{cases}$$

(reamintim că pentru doi vectori nenuli u și v, proiecția lui u pe v este $pr_v u = \dfrac{\langle u, v\rangle}{\langle v, v\rangle} v$)

Dacă notăm $v_k = \dfrac{u_k}{\|u_k\|} = \dfrac{u_k}{\sqrt{\langle u_k, u_k\rangle}}$, $k = \overline{1,n}$, atunci $v_1, \dots, v_n$ formează un sistem ortonormat de vectori din $\mathbb{R}^m$ cu proprietatea că $Sp\{e_1, \dots, e_k\} = Sp\{v_1, \dots, v_k\}$, $(\forall)\ k = \overline{1,n}$. Atunci relațiile (1) se mai scriu

$$\begin{cases} \|u_1\| \cdot v_1 = e_1 \\ \|u_k\| \cdot v_k = e_k - \sum_{j=1}^{k-1} \dfrac{\langle e_k, u_j\rangle}{\langle u_j, u_j\rangle} \|u_j\| \cdot v_j, \quad k = \overline{2,n} \end{cases}$$

de unde obținem

$$(2)\begin{cases} e_1 = v_1 \cdot \|u_1\| \\ e_K = \sum_{j=1}^{K-1} \dfrac{\langle e_K, u_j\rangle}{\langle u_j, u_j\rangle} \cdot \|u_j\| \cdot v_j + \|u_K\| \cdot v_K \end{cases}$$

Cum $Sp\{e_1,\dots,e_K\} = Sp\{v_1 \dots v_K\}$ $(\forall)\, K=\overline{1,n}$ și $v_1,\dots,v_n$ sunt un sistem ortonormat de vectori, relațiile (2) sunt echivalente cu

$$(3)\begin{cases} e_1 = \langle e_1, v_1\rangle v_1 \\ e_K = \sum_{j=1}^{K} \langle e_j, v_j\rangle v_j \quad , \quad K=\overline{2,n} \end{cases}$$

(reamintim că în raport cu o bază ortonormată $\{v_1,\dots,v_K\}$, coordonatele unui vector x se obțin cu formula $x = \sum_{j=1}^{K} \langle x, v_j\rangle v_j$)

Scris în formă matricială, (3) devine:

$$\underbrace{(e_1|\ \dots\ |e_n)}_{A \in \mathcal{M}_{m,n}(\mathbb{R})} = \underbrace{(v_1|\dots|v_n)}_{Q \in \mathcal{M}_{m,n}(\mathbb{R})} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \langle e_1, v_1\rangle & \langle e_2, v_1\rangle & \dots & \langle e_n, v_1\rangle \\ 0 & \langle e_2, v_2\rangle & \dots & \langle e_n, v_2\rangle \\ \vdots & 0 & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \\ 0 & 0 & \dots & \langle e_n, v_n\rangle \end{pmatrix}}_{\text{notăm } R \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})}$$

adică $A = Q \cdot R$, unde:

- coloanele lui Q sunt vectori ortonormați; în particular $Q^t \cdot Q = I_n$
- R este o matrice superior triunghiulară cu toate elementele de pe diagonală nenule, deci inversabilă.

2. Pseudosoluția unui sistem liniar incompatibil.

Fie $m, n \in \mathbb{N}^*$, $m > n$ și considerăm sistemul:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

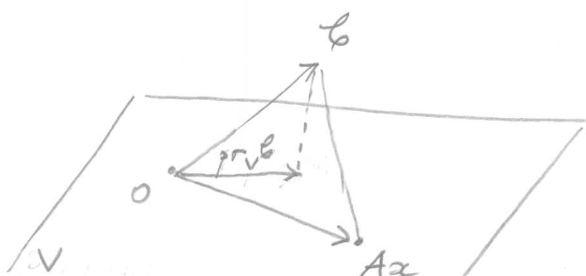
Notăm $A = (a_{ij})_{\substack{i=\overline{1,m} \\ j=\overline{1,n}}}$, $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$. Atunci sistemul se scrie matricial $Ax = b$. Fie $e_1, \dots, e_n \in \mathbb{R}^m$ vectorii coloană din matricea A, și $V = Sp\{e_1, \dots, e_n\} \subseteq \mathbb{R}^m$.

Atunci sistemul $Ax = b$ are soluție $\iff b \in V$.

Dacă b nu aparține subspațiului generat de coloanele matricii A, sistemul este incompatibil.

În aplicațiile numerice, suntem totuși uneori interesați în determinarea unui vector $x \in \mathbb{R}^n$ pentru care $\|Ax - b\|$ este minimă. Intuitiv, aceasta reprezintă distanța de la b la hiperplanul generat de coloanele matricii A și este minimă când

$$Ax = pr_V b$$



Vom presupune acum că $\text{rang}\, A = n$ sau echivalent, că vectorii $e_1, \dots, e_n$ sunt liniar independenți. Atunci $\boxed{A = QR}$ (cu notațiile din pag. 1-2) și $V = Sp\{e_1, \dots, e_n\} = Sp\{v_1, \dots, v_n\}$. Proiecția vectorului b pe V va fi $pr_V b = \sum_{j=1}^{n} \langle b, v_j \rangle v_j$ (reamintim că $\{v_1, \dots, v_n\}$ formează o bază ortonormată în V). Aceasta se mai poate scrie

$$pr_V b = \sum_{j=1}^{n} v_j \cdot \langle v_j, b \rangle = \sum_{j=1}^{n} v_j \cdot (v_j^t \cdot b) = Q \cdot Q^t \cdot b$$

(matricea Q are coloanele $v_1, \dots, v_n$)

Rezolvăm acum sistemul

$$Ax = pr_V b = Q \cdot Q^t \cdot b$$

$$Q \cdot R \cdot x = Q \cdot Q^t \cdot b \quad / Q^t$$

$$\underbrace{Q^t \cdot Q}_{I_n} \cdot R \cdot x = \underbrace{Q^t \cdot Q}_{I_n} \cdot Q^t \cdot b$$

$$R \cdot x = Q^t \cdot b$$

$\boxed{x = R^{-1} Q^t b}$ se numește pseudosoluția sistemului