Transformări ortogonale: Householder şi Givens. Algoritmul Gram-Schmidt. Polinoame ortogonale

Noțiuni teoretice

Vectori ortogonali. Matrice ortogonală

Fie vectorii coloană $x,y\in R^n$ de forma $x=\begin{bmatrix}x_1&x_2&\dots&x_n\end{bmatrix}^T$ și $y=\begin{bmatrix}y_1&y_2&\dots&y_n\end{bmatrix}^T$. Definim:

• produsul scalar:
$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = y^T x;$$

• norma euclidiană:
$$||x||_2 = \sqrt{\langle x, x \rangle} = \sqrt{x^T x} = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2\right)^{1/2}$$
.

Spunem că:

- vectorii x şi y sunt ortogonali dacă $\langle x, y \rangle = 0$;
- vectorii x şi y sunt ortonormați dacă sunt ortogonali, $||x||_2 = 1$ şi $||y||_2 = 1$.

O matrice $H \in R^{n \times n}$ este ortogonală dacă are coloanele vectori ortonormați. Mai mult, o matrice ortogonală are proprietățile următoare:

1.
$$H^T H = H H^T = I_n$$
;

- 2. $H^{-1} = H^T$;
- 3. $||Hx||_2 = ||x||_2$;
- 4. $||H||_2 = 1$;

- 5. $||HA||_2 = ||A||_2$;
- 6. $det(H) = \pm 1$.

Transformarea Householder

Metoda propusă inițial de Alston Scott Householder este folosită pentru a transforma o matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrică într-o matrice tridiagonală cu aceleași valori proprii. Prezentarea generală a metodei poate fi gasită la adresa ¹.

Pentru o matrice $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, definim transformarea Householder R = HA folosind reflectori elementari Householder H_p , astfel încât:

$$H = H_{min(m-1,n)} \dots H_p \dots H_2 H_1, \quad A = H^T R.$$

Un reflector elementar Householder H_p este dat de relația:

$$H_p = I_m - 2\frac{v_p v_p^T}{v_p^T v_p}$$

unde:

- $v_p = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & v_{pp} & \cdots & v_{mp} \end{bmatrix}^T$ se numeşte vector Householder;
- $v_{pp} = a_{pp} + \sigma_p$;
- $v_{ip} = a_{ip}, \forall i > p;$
- $a_p = \begin{bmatrix} a_{1p} & a_{2p} & \cdots & a_{pp} \\ \sigma_p = sign(a_{pp}) \sqrt{\sum_{i=p}^m a_{ip}^2}; \end{bmatrix}^T$ este coloana p din matricea A;

Folosind un reflector elementar Householder putem aduce o matrice la forma superior triunghiulară astfel:

Datorită formei reflectorilor elementari Householder, înmulțirea $A = H_p A$ se efectuează astfel:

- Coloanele 1:p-1 din matricea Arămân neschimbate;
- Coloana p din matricea A se modifică astfel:
 - elementele de pe liniile 1: p-1 rămân neschimbate;
 - $-a_{pp}=-\sigma_p;$

http://mathfaculty.fullerton.edu/mathews/n2003/HouseholderMod.html

Algorithm 1 Transformarea unei matrice la forma superior triunghiulară

```
1: procedure [Q, R] = ST(A)
 2:
           [m,n] = size(A);
           H = I_n;
 3:
           for p = 1 : min(m-1, n) do
 4:
               \mathbf{H}_{p} = \mathbf{I}_{n} - 2 \frac{\mathbf{v}_{p} v_{p}^{T}}{v_{p}^{T} v_{p}};
\mathbf{A} = \mathbf{H}_{p} \mathbf{A};
 5:
 6:
                H = H_p H;
 7:
          end for
 8:
          Q = H^T;
 9:
           R = A;
10:
11: end procedure
```

$$-a_{ip}=0, \forall i>p;$$

- Coloanele j = p + 1 : n din matricea A se modifică astfel:
 - -elementele de pe liniile 1:p-1rămân neschimbate;

$$-a_{ij} = a_{ij} - \tau_j \cdot v_{ip}, \forall i \ge p, \tau_j = \frac{\sum_{i=p}^m v_{ip} \cdot a_{ij}}{\beta_p}.$$

Transformarea Givens

Metoda Givens este folosită pentru a descompune o matrice $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ astfel:

$$A = G^T R$$

unde:

$$G = G_{n-1,m}G_{n-2,m}G_{n-2,m-1}\dots G_{1m}\dots G_{13}G_{12}, \quad R = GA.$$

O matrice de rotație Givens, notată G_{kl} este folosită pentru a elimina (a anula) elementul A(l,k) de sub diagonala principală (k < l) și are forma:

Transformări ortogonale: Householder și Givens. Algoritmul Gram-Schmidt. Polinoame ortogonale

$$G_{kl} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cos\theta & \cdots & -\sin\theta & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sin\theta & \cdots & \cos\theta & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

Pentru a determina matricea de rotație Givens G_{kl} , vom folosi relațiile:

$$\rho = \sqrt{A(k,k)^2 + A(l,k)^2}$$

$$s = \sin \theta = -\frac{A(l,k)}{\rho}$$

$$c = \cos \theta = \frac{A(k,k)}{\rho}$$

Datorită formei matricelor de rotație Givens, înmulțirea $G_{kl}x$, unde x este vector coloană, se efectuează astfel:

- $x(k) = c \cdot x(k) s \cdot x(l)$;
- $x(l) = s \cdot x(k) + c \cdot x(l)$;
- restul elementelor rămân neschimbate.

Algoritmul Gram-Schmidt

Vom considera relația A=QR, adică:

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix}$$

cu necunoscutele q_i și $r_{ij}, (i \le j)$, unde:

- a_i este coloana i din matricea A;
- q_i este coloana i din matricea Q;
- $r_{ij}, i \leq j$, reprezintă elementele din matricea superior triunghiulară R.

Algoritmul Gram-Schmidt este schiţat în continuare:

Pentru
$$j = 1 : n$$

$$r_{ij} = q_i^T a_j, \quad i = 1 : j - 1;$$

$$aux = a_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} q_i;$$

$$r_{jj} = ||aux||_2;$$

$$q_j = \frac{aux}{r_{jj}}.$$

Polinoame ortogonale

Un polinom ortogonal este definit prin:

- relația de recurență;
- cazurile de bază ale relației de recurență;
- intervalul [/(a, b)/] pe care este definit;
- funcția pondere w(x), folosită la calcularea produsului scalar.

Exemple de polinoame ortogonale:

• Cebâşev:

$$T_{n+1} - 2xT_n + T_{n-1} = 0$$
, $T_0 = 1$, $T_1 = x$; $(-1,1)$; $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$;

• Legendre:

$$(n+1)L_{n+1} - (2n+1)xL_n + nL_{n-1} = 0, L_0 = 1, L_1 = x;$$

[-1,1]; $w(x) = 1;$

• Laquerre:

$$G_{n+1} - (2n+1-x)G_n + n^2G_{n-1} = 0, \quad G_0 = 1, \quad G_1 = 1-x;$$

 $[0,\infty); \quad w(x) = e^{-x};$

• Hermite:

$$H_{n+1} - 2xH_n + 2nH_{n-1} = 0$$
, $H_0 = 1$, $H_1 = 2x$;
 $(-\infty, \infty)$; $w(x) = e^{-x^2}$

.

Proprietățile polinoamelor ortogonale sunt:

- 1. Orice polinom ortogonal are radacinile în intervalul [/(a, b)/], reale și distincte;
- 2. Orice polinom ortogonal este ortogonal cu orice polinom de grad mai mic decât el

Polinoamele p_0, p_1, \dots, p_n reprezintă o bază de polinoame ortogonale, dacă:

```
• ||p_i|| = 1, \forall i; și
```

```
• \langle p_i, p_j \rangle = 0, \forall i \neq j, unde \langle p_i, p_j \rangle = \int_a^b p_i(x) p_j(x) w(x) dx.
```

Operații utile cu polinoame în Octave:

```
function test_poly
      %%% Coeficientii polinomului p
      p = [21 -1]
      %%% Afisarea polinomului
      polyout(p, 'x')
      %%% Coeficientii polinomului q
      q = [1 2]
      %%% Afisarea polinomului
      polyout(q, 'x')
      %%% Produsul dintre p si q
      r = conv(p,q)
      %%% Afisarea rezultatului
12
      polyout(r, 'x')
13
  endfunction
```

Listing 1: Polinoame în Octave.

Probleme rezolvate

Problema 1

Dacă H_1, H_2 sunt matrici ortogonale, arătați că produsul H_1H_2 este o matrice ortogonală.

Soluție:

Transformări ortogonale: Householder și Givens. Algoritmul Gram-Schmidt. Polinoame ortogonale

Din proprietățile matricelor ortogonale, avem: Hortogonală $\Rightarrow HH^T=I_n$ și

$$\begin{cases} H_1 H_1^T = I_n \\ H_2 H_2^T = I_n \end{cases} \Rightarrow (H_1 H_2) (H_1 H_2)^T = H_1 H_2 H_2^T H_1^T = I_n$$

Problema 2

Fie un reflector elementar Householder

$$H = I_n - \frac{2uu^T}{\left\|u\right\|^2}$$

.

- a) Arătați că $H^T = H$;
- b) Calculați Hu.

Soluție:

a)
$$H^T = \left(I_n - \frac{2uu^T}{\|u\|^2}\right)^T = I_n - \frac{2uu^T}{\|u\|^2} = H$$

b)
$$Hu = \left(I_n - \frac{2uu^T}{\|u\|^2}\right)u = u - \frac{2uu^T}{\|u\|^2}u = u - 2u = -u$$

Problema 3

Determinați factorizarea QR folosind transformarea Householder pentru matricea:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 5 \\ 1 & -1 & 1 \\ 2 & 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Soluţie:

Prima iterație:

$$a_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \sigma_1 = \|a_1\|_2 = 3 \quad u_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \|u_1\|_2^2 = 6;$$

$$H_{1} = I_{3} - \frac{2u_{1}u_{1}^{T}}{\|u_{1}\|_{2}^{2}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & -1 & -2\\ -1 & 1 & 2\\ -2 & 2 & 4 \end{bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2\\ 1 & 2 & -2\\ 2 & -2 & -1 \end{bmatrix}$$

$$A_{2} = H_{1}A_{1} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2\\ 1 & 2 & -2\\ 2 & -2 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 4 & 5\\ 1 & -1 & 1\\ 2 & 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 3\\ 0 & 0 & 3\\ 0 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

A doua iterație:

$$\overline{a_2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix} \quad \sigma_2 = \|\overline{a_2}\|_2 = 3 \quad u_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \|u_2\|_2^2 = 2;$$

$$H_2 = I_3 - \frac{2u_2u_2^T}{\|u_2\|_2^2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A_3 = H_2 A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \begin{bmatrix} 3 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 3 \\ 0 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

Atunci:

$$R = A_3 = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 3 \\ 0 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

$$Q = (H_2 H_1)^T = H_1 H_2 = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 2 \\ 2 & -1 & -2 \end{bmatrix}$$

Problema 4

Să se scrie un program OCTAVE care să implementeze transformarea Givens. Programul primește ca date de intrare: A - matricea sistemului; b - vectorul termenilor liberi. Rezultatele programului vor fi: Q - matricea factor ortogonală; R - matricea factor superior triunghiular; b - vectorul modificat al termenilor liberi.

```
function [Q R b] = givens(A, b)
    [m n] = size(A);
    G = eye(m);
    for k = 1 : n-1
      for 1 = k + 1 : m
        r = sqrt(A(k,k)^2 + A(1,k)^2);
        c = A(k,k)/r;
        s = -A(l,k)/r;
9
        t = c*A(k,k:n) - s*A(l,k:n);
11
        A(1,k:n) = s*A(k,k:n) + c*A(1,k:n);
12
        A(k,k:n) = t;
13
14
        u = c*b(k) - s*b(1);
        b(1) = s*b(k) + c*b(1);
17
        b(k) = u;
18
        t = c*G(k,1:m) - s*G(1,1:m);
19
        G(1,1:m) = s*G(k, 1:m) + c*G(1,1:m);
        G(k,1:m) = t;
21
      end
22
    end
23
24
    Q = G';
25
    R = A;
26
  end
```

Listing 2: Transformarea Givens.

Problema 5

Să se scrie un program OCTAVE pentru calculul coeficienților unui polinom ortogonal de grad n. Selecția polinomului se face printr-un parametru șir de caractere care poate avea valorile: 'cebasev', 'legendre', 'laguerre' sau 'hermite'.

Soluție:

```
function P = poliOrtogonal(nume_polinom, n)
```

```
if strcmp(nume_polinom, 'legendre')
      P0 = [1];
      P1 = [1 \ 0];
5
      C0 = @(n)([-n/(n+1)]);
      C1 = @(n)([(2*n+1)/(n+1) 0]);
    endif
    if strcmp(nume_polinom, 'cebasev')
10
      P0 = [1];
11
      P1 = [1 \ 0];
12
      C0 = @(n)([-1]);
13
      C1 = @(n)([2 0]);
    endif
15
16
    if strcmp(nume_polinom, 'laguerre')
17
18
      P0 = [1];
      P1 = [-1 \ 1];
19
      C0 = @(n)([-n^2]);
20
      C1 = @(n)([-1 2*n+1]);
22
23
    if strcmp(nume_polinom, 'hermite')
24
      P0 = [1];
      P1 = [2 \ 0];
26
      C0 = @(n)([-2*n]);
      C1 = @(n)([2 0]);
    endif
29
    P = poliOrtogonalGeneral(n, P0, P1, C0, C1);
  endfunction
```

```
function P = poliOrtogonalGeneral(n, P0, P1, C1, C2)
%Pn+1 = C1(n)*Pn + C2(n)*Pn-1
%Valori initiale: P0, P1
%Iesire: Pn

%Cazuri de baza
if n == 0
P = P0;
```

```
endif
9
    if n == 1
      P = P1;
12
    endif
13
14
    %Ultimii 2 termeni ai recurentei sunt pastrati in PO si P1
15
    for i=2:n
16
      Paux1 = conv(P0, C1(i));
17
      Paux2 = conv(P1, C2(i));
18
19
      m = length(Paux1);
      n = length(Paux2);
      r = max(m, n);
22
23
      Paux1(r-m+1:r) = Paux1(1:m);
25
      Paux1(1:r-m) = zeros(1,r-m);
26
      Paux2(r-n+1:r) = Paux2(1:n);
27
      Paux2(1:r-n) = zeros(1,r-n);
29
      Paux = Paux1 + Paux2;
30
      P0 = P1;
      P1 = Paux;
33
    endfor
34
    P = P1;
36
  endfunction
```

Probleme propuse

Problema 1

Se consideră vectorii $u, v \in \mathbb{R}^n$ ortonormați ($||u||_2 = 1, ||v||_2 = 1, u^T v = v^T u = 0$). Se formează vectorul x = u + v.

a) Să se dea exemplu de doi vectori ortonormați;

- b) Să se calculeze $||x||_2$;
- c) Se formează matricea $H = I_n xx^T$. Să se calculeze Hu, Hv şi $||H||_2$;
- d) Dacă $A = uv^T$, calculați $B = H^{-n}AH^n$.

Problema 2

Implementați transformarea Householder pentru o matrice A, astfel:

a) Implementați o funcție care primește un vector x, un index p și calculează parametrii σ, v_p, β definiți mai sus:

```
function [vp, sigma, beta] = GetHSReflector(x, p)
```

b) Implementați o funcție care primește un vector x, un index p, parametrul sigma și calculează transformarea Householder aplicată asupra vectorului, considerând că acest vector a fost folosit la calculul parametrilor (coloana p din A).

function
$$x = ApplyHSToPColumn(x, p, sigma)$$

c) Implementați o funcție care primește un vector oarecare x, un index p, vectorul Householder v_p parametrul beta și calculează transformarea Householder aplicată asupra vectorului (coloanele p+1:n din A).

```
function x = ApplyHSToRandomColumn(x, vp, p, beta)
```

d) Implementați funcția

function
$$[Q, R] = Householder(A),$$

folosind funcțiile definite mai sus.

Problema 3

Să se determine descompunerea QR pentru matricea $A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 \\ -2 & 1 & 3 \end{bmatrix}$ folosind transformarea Givens.

Transformări ortogonale:	Householder şi Givens. Algoritmul Gram-Schmidt. Polinoame ortogonale

Problema 4

 ${\bf S} \breve{{\bf a}}$ se scrie un program OCTAVE pentru a implementa algoritmul Gram-Schmidt.