Γραμμική Άλγεβρα

Ορθοκανονικοποίηση Gram-Schmidt

Έστω μία βάση ενός διανυσματικού χώρου V, $\{\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n\}$. Η μέθοδος Gram-Schmidt κατασκευάζει μία ορθοκανονική βάση με γραμμικούς συνδυασμούς προβολών της αρχικής βάσης. Η κατασκευή γίνεται διαδοχικά σε δύο στάδια, με την εύρεση ενός ορθογώνιου διανύσματος σε όλα τα προηγούμενα και με την κανονικοποίησή του. Θα συμβολίζουμε με $\{\mathbf{e}_k, k = 1, \ldots, n\}$ τα ορθογώνια διανύσματα και με $\{\mathbf{q}_k, k = 1, \ldots, n\}$ τα αντίστοιχα κανονικοποιημένα.

Γίνεται αρχικοποίηση με το πρώτο διάνυσμα,

$$\mathbf{e}_1 = \mathbf{v}_1, \quad \mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{e}_1}{\|\mathbf{e}_1\|}.$$

Το δεύτερο διάνυσμα, $\mathbf{e}_2$, προκύπτει με την αφαίρεση από το $\mathbf{v}_2$ της προβολής του στο διάνυσμα που ήδη έχει κατασκευασθεί,

$$\mathbf{e}_2 = \mathbf{v}_2 - \lambda_1 \mathbf{q}_1, \;\text{ με } \lambda_1 = \mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_2, \;\text{ οπότε } \mathbf{e}_2 = \mathbf{v}_2 - (\mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_2)\mathbf{q}_1 \;\text{ και } \mathbf{q}_2 = \frac{\mathbf{e}_2}{\|\mathbf{e}_2\|}.$$

Συνεχίζουμε με τον ίδιο τρόπο αφαιρώντας κατάλληλα προβολές στα ήδη κατασκευασμένα διανύσματα. Σημειώνουμε ότι λόγω γραμμικής ανεξαρτησίας τα διανύσματα που προκύπτουν δεν είναι μηδενικά. Άρα θα έχουμε, για $k = 2, \ldots, n$,

$$\mathbf{e}_k = \mathbf{v}_k - \sum_{i=1}^{k-1} \lambda_i \mathbf{q}_i, \;\text{ με } \lambda_i = \mathbf{q}_i^T \mathbf{v}_k, \;\text{ οπότε } \mathbf{e}_k = \mathbf{v}_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{q}_i^T \mathbf{v}_k)\mathbf{q}_i \;\text{ και } \mathbf{q}_k = \frac{\mathbf{e}_k}{\|\mathbf{e}_k\|}.$$

Παραγοντοποίηση πίνακα $A = QR$

Θεωρούμε πίνακα A με γραμμικά ανεξάρτητες στήλες, έστω $\{\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n\}$. Μπορεί να εφαρμοσθεί η μέθοδος Gram-Schmidt για την κατασκευή ενός πίνακα Q με στήλες $\{\mathbf{q}_k, k = 1, \ldots, n\}$. Οι σχέσεις μεταξύ των στηλών του πίνακα A και του πίνακα Q είναι γραμμικές και συγκεκριμένα με βάση τα ανωτέρω

$$\mathbf{v}_k = \|\mathbf{e}_k\| \mathbf{q}_k + \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{q}_i^T \mathbf{v}_k)\mathbf{q}_i, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Από τη σχέση αυτή προκύπτει ότι $\|\mathbf{e}_k\| = \mathbf{q}_k^T \mathbf{v}_k$. Οπότε

$$\mathbf{v}_k = \sum_{i=1}^{k} (\mathbf{q}_i^T \mathbf{v}_k)\mathbf{q}_i, \quad k = 1, \ldots, n,$$

που δείχνει ότι οι στήλες του A είναι γραμμικοί συνδυασμοί των στηλών του Q. Μπορούμε να γράψουμε $A = QR$, όπου R είναι τετραγωνικός, άνω τριγωνικός και αντιστρέψιμος πίνακας ως εξής

$$R = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_1 & \mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_n \\ 0 & \mathbf{q}_2^T \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{q}_2^T \mathbf{v}_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathbf{q}_n^T \mathbf{v}_n \end{bmatrix}.$$

Ακολουθεί παράδειγμα εφαρμογής στον πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 1 & \alpha \\ 1 & \beta \end{bmatrix},$$

με $\alpha < \beta$. Θα είναι

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 2 & \beta + \alpha \\ 0 & \beta - \alpha \end{bmatrix}.$$

Στο παράδειγμα ο πίνακας είναι τετραγωνικός. Ωστόσο η παραγοντοποίηση μπορεί να γίνει και για παραλληλόγραμμους πίνακες με αριθμό γραμμών $m > n$. Χρησιμοποιώντας την παραγοντοποίηση, και λαμβάνοντας υπόψη ότι $Q^T Q = I$ και ότι ο πίνακας R είναι αντιστρέψιμος, η λύση ελαχίστων τετραγώνων δίδεται ως εξής

$$A^T A\widehat{\mathbf{x}} = A^T b \Longleftrightarrow R^T Q^T Q R\widehat{\mathbf{x}} = R^T Q^T b \Longleftrightarrow R^T R\widehat{\mathbf{x}} = R^T Q^T \mathbf{b} \Longleftrightarrow R\widehat{\mathbf{x}} = Q^T \mathbf{b},$$

που επιλύεται εύκολα, επειδή ο πίνακας R είναι άνω τριγωνικός.