# Ortogonalitate. Transformări ortogonale.

Colaboratori: Andrei STAN, Mihaela-Andreea Vasile, Florin Pop

February 18, 2025

## Cuprins

# 1 Obiective laborator

În urma parcurgerii acestui laborator, studentul va fi capabil să:

- definească noțiunile de vectori ortogonali și matrice ortogonală;
- aplice metode de transformare ortogonală: Householder și Givens;
- implementeze procesul Gram-Schmidt;
- folosească polinoame ortogonale.

# 2 Noțiuni teoretice

## 2.1 Norme

Considerând un spațiu vectorial $V$ peste un corp $\mathbb{K}$, o normă pe $V$ este o funcție $||\cdot|| : V \to \mathbb{R}$ care satisface următoarele proprietăți pentru orice $x, y \in V$ și $\alpha \in \mathbb{K}$:

- $||x|| \geq 0$ și $||x|| = 0 \Leftrightarrow x = 0$ (pozitiv definită);
- $||\alpha x|| = |\alpha| \cdot ||x||$;
- $||x + y|| \leq ||x|| + ||y||$ (inegalitatea triunghiului).

### 2.1.1 Norme vectoriale

- **Valoarea absolută.** Este o normă pe $\mathbb{R}$ sau $\mathbb{C}$. Numerele complexe formează un spațiu uni-dimensional peste $\mathbb{C}$ și unul bi-dimensional peste $\mathbb{R}$.
- **Distanța Manhatten.** $||\mathbf{x}||_1 \coloneqq \sum_i |x_i|$.
- **Norma euclidiană.** Pe $\mathbb{R}^n$, norma euclidiană este definită ca $||\mathbf{x}||_2 \coloneqq \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2}$. Luând în considerare numerele complexe, acestea se identifică cu $\mathbb{R}^2$.
- **Norma infinit.** $||\mathbf{x}||_\infty \coloneqq \max_i |x_i|$.
- **Norma *p*.** $||\mathbf{x}||_p \coloneqq \left(\sum_i |x_i|^p\right)^{1/p}$. Normele de mai sus sunt particularizări ale normei $p$ pentru diferite valori ale lui $p$.

### 2.1.2 Norme matriceale

Multe norme matriceale mai au proprietatea de a fi *submultiplicative*:

$$||AB|| \leq ||A|| \cdot ||B||$$

- **Norma *p* matriceală.** Ea este indusă de norma $p$ a vectorilor.
  $||A||_p \coloneqq \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||_p}{||x||_p} = \max_{||x||=1} ||Ax||_p$.
  - **p = 1.** $||A||_1 \coloneqq \max_j \sum_i |a_{ij}|$. Este suma maximă a valorilor absolute de pe coloane.

- **p = 2. Norma/Raza spectrală.** $||A||_2 := \sqrt{\lambda_{max}(A^*A)}$. Este rădăcina patrată a celei mai mari valori proprii a matricei $A^*A$. Este egala cu cea mai mare valoare singulară a matricei $A$.
  **Demonstrație.** Fie $B = A^*A$. Atunci $B$ este simetrică și din teorema spectrală avem o bază ortonormată de vectori proprii $v_i$ și valori proprii $\lambda_i$. Fie $v = \sum_i \alpha_i v_i$ și $||v|| = 1$. Atunci:

$$||Av||_2^2 = \langle Av, Av\rangle = \langle v, A^*Av\rangle = \langle \sum_i \alpha_i v_i, \sum_i \alpha_i \lambda_i v_i\rangle = \sum_i \lambda_i \alpha_i^2$$

  Având constrângerea $||v|| = 1$, $\sum_i \alpha_i^2 = 1 \implies ||A||_2 = \lambda_{max}(A)$. ■
- **p = ∞.** $||A||_\infty := \max_i \sum_j |a_{ij}|$. Este suma maximă a valorilor absolute de pe rânduri.

- **Norma Frobenius.** $||A||_F := \sqrt{\sum_{i,j} |a_{ij}|^2} = \sqrt{trace(A^*A)}$.

**Teorema Gelfand.** Pentru orice normă matriceală avem:

$$\lim_{k\to\infty} ||A^k||^{1/k} = \rho(A)$$

Mai mult, $\rho(A) \leq ||A||$ pentru orice normă matriceală.

**Demonstrație.** Fie $\lambda$ valoarea proprie cea mai mare a lui $A$ și $v$ un vector propriu asociat. Atunci:

$$||A|| \geq \frac{||Av||}{||v||}(\forall v) = \frac{||\lambda v||}{||v||} = |\lambda| \Rightarrow \rho(A) \leq ||A||$$

Ce ne indică normele matriceale induse de vectori? Ele ne dau o măsură a cât de mult se dilată un vector atunci când este aplicată o anumită transformare liniară. În 1 avem o reprezentare a vectorilor unitari.

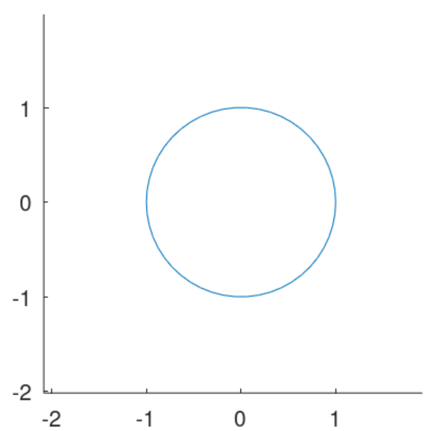



Figura 1: Vectori unitate

Ce se întâmplă dacă aplicăm transformarea $A1 = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$?

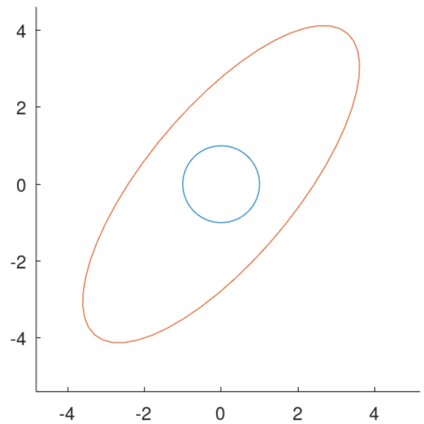



Figura 2: Transformarea $A1$

## 2.2 Produs scalar. Proiecții.

Produsul scalar al unui spațiu vectorial $V$ peste $F$ este o funcție $\langle\cdot,\cdot\rangle : V \times V \rightarrow F$ care satisface următoarele proprietăți pentru orice $x, y, z \in V$ și $\alpha \in F$:

- $\langle x, y\rangle = \overline{\langle y, x\rangle}$ (conjugare simetrică);
- $\langle \alpha x + \beta y, z\rangle = \alpha\langle x, z\rangle + \beta\langle y, z\rangle$ (liniaritate);
- $\langle x, x\rangle \geq 0$ și $\langle x, x\rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$ (pozitivitate).

Din aceastea rezultă și altele:

- $\langle x, \alpha y + \beta z\rangle = \overline{\alpha}\langle x, y\rangle + \overline{\beta}\langle x, z\rangle$;
- $\langle x + y, x + y\rangle = \langle x, x\rangle + 2\Re(\langle x, y\rangle) + \langle y, y\rangle$;

Orice produs scalar induce o normă pe spațiul vectorial $V$ prin $||x|| = \sqrt{\langle x, x\rangle}$.

Într-un spațiu euclidian, produsul scalar este definit ca $\langle x, y\rangle = x^T y$.

### 2.2.1 Proiecții

**Teoremă.** $\langle x, y\rangle = u^T v = ||u||||v|| \cos(\theta)$, unde $\theta$ este unghiul dintre cei doi vectori.

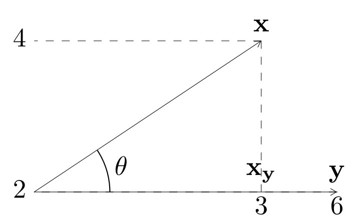
**Demonstrație.** Fie $\mathbf{r} = \mathbf{u} - \mathbf{v}$. Atunci, din teorema cosinusului avem:

$$
\begin{aligned}
||\mathbf{r}||^2 &= ||\mathbf{u}||^2 + ||\mathbf{v}||^2 - 2||\mathbf{u}||||\mathbf{v}||\cos(\theta) \\
||\mathbf{u}-\mathbf{v}||^2 - ||\mathbf{u}||^2 - ||\mathbf{v}||^2 &= -2||\mathbf{u}||||\mathbf{v}||\cos(\theta) \\
-2\sum_i u_i v_i &= -2||\mathbf{u}||||\mathbf{v}||\cos(\theta) \\
\sum_i u_i v_i &= ||\mathbf{u}||||\mathbf{v}||\cos(\theta)
\end{aligned}
$$

Astfel, putem scrie produsul scalar ca $\langle x, y\rangle = u^T v = ||u||||v||\cos(\theta)$. ■

Fie doi vectori $\mathbf{x}$ și $\mathbf{y}$, iar proiecția lui $\mathbf{x}$ pe $\mathbf{y}$ este $\mathbf{x_y}$. Pentru a îl găsi pe $\mathbf{x_y}$, ne gândim astfel:

- În primul rând, ne trebuie norma lui $\mathbf{x_y}$: $||\mathbf{x}||\cos(\theta)$.
- Având norma, trebuie să avem și o direcție. Proiecția fiind pe $\mathbf{y}$, o putem găsi prin *normalizare*: $\frac{\mathbf{y}}{||\mathbf{y}||}$.




Avem și o interpretare geometrică a produsului scalar: produsul dintre norma proiecției pe un vector și norma vectorului pe care se proiectează.

Definim operatorul de proiecție astfel: $proj_y x = \frac{||x||\cos(\theta)}{||y||} y = \frac{\langle x,y\rangle}{\langle y,y\rangle} y$.

$$
proj_y x = \frac{||x||\cos(\theta)}{||y||} y = \frac{||y||||x||\cos(\theta)}{||y||^2} y = \frac{\langle x, y\rangle}{\langle y, y\rangle} y
$$

## 2.3 Vectori ortogonali. Matrice unitară/ortogonală.

Doi vectori $x, y \in \mathbb{R}^n$ sunt ortogonali dacă produsul lor scalar este zero, adică $x^T y = 0$. Cu alte cuvinte, direcțiile lor sunt perpendiculare. În plus, dacă $||x||_2 = ||y||_2 = 1$, atunci cei doi vectori sunt *ortonormați*.

O bază a unui spațiu vectorial se numește ortogonală, respectiv ortonormată, dacă vectorii acesteia sunt ortogonali, respectiv ortonormați.

O matrice $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ se numește *unitară* dacă $A^*A = AA^H = I_n$, unde $A^*$ este conjugata transpusă a lui $A$. Dacă $A$ este reală, atunci matricea se numește *ortogonală* și putem scrie $A^TA = AA^T = I_n$. Ele sunt foarte utilizate în diverse aplicații, precum descompunerea QR sau descompunerea valorilor singulare.

O matrice $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ sau $\mathbb{R}^{n\times n}$ unitară/ortogonală are următoarele proprietăți:

- coloanele (rândurile) sale formează o bază ortonormată a spațiului vectorial $\mathbb{C}^n$ sau $\mathbb{R}^n$;
- norma vectorilor coloană (rând) este 1;
- $A^{-1} = A^*$ sau $A^{-1} = A^*$;

- este normală, adică $A^*A = AA^*$;
- este diagonalizabilă;
- valorile proprii se află pe cercul unitate;
- vectorii proprii sunt ortogonali;
- $det(A) = \pm 1$;
- $||A||_2 = 1$;
- conservă produsul scalar: $(Ax)^*(Ay) = x^*A^*Ay = x^*y$;

Astfel, matricile ortogonale se pot interpreta geometric ca fiind rotații, reflecții, permutări, identități sau combinații ale acestora.

Ce se întâmplă dacă aplicăm o matrice ortogonală asupra vectorilor unitari?
Fie $A2 = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\pi}{7}) & -sin(\frac{\pi}{7}) \\ sin(\frac{\pi}{7}) & cos(\frac{\pi}{7}) \end{bmatrix}$.

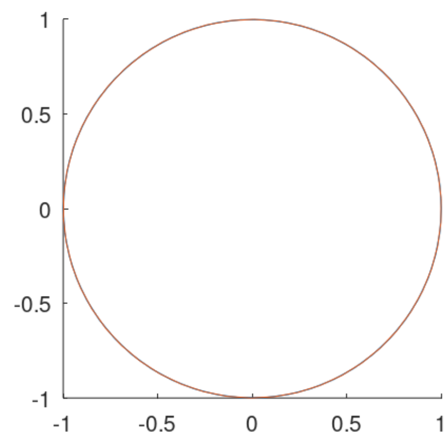



Figura 3: Transformarea $A2$

Toți vectorii au fost rotiți cu un unghi de $\frac{\pi}{7}$. Nu s-a modificat nimic altceva! Norma vectorilor a rămas la fel și deci graficele coincid. În următoarea figură, aplicăm $A3 = 2 * A2$, matrice care nu mai este ortogonală.

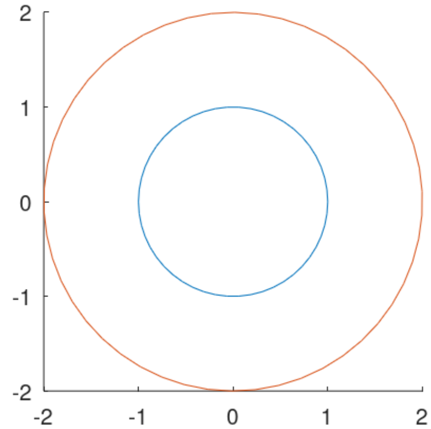



Figura 4: Transformarea $A2$

## 2.4 Transformări ortogonale. Descompunerea QR.

**Definiție.** Fie $T : V \to V$ o transformare liniară.

$$T \text{ - ortogonală} \equiv \langle T(x), T(y) \rangle = \langle x, y \rangle$$

Utilitatea transformărilor ortogonale în cazul sistemelor liniare constă în faptul că putem aplica o serie de astfel transformări pentru a introduce 0-uri în matricea sistemului. La final, aflarea soluției va consta în rezolvarea unui sistem triunghiular. Matricea va avea forma $A = QR$, unde $Q$ este o matrice ortogonală și $R$ este o matrice superior triunghiulară.

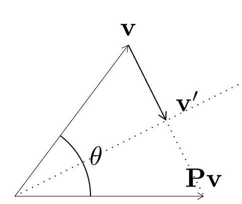
$$Ax = b \Leftrightarrow QRx = b \Leftrightarrow Rx = Q^* b$$

Cu aceste transformări, ne dorim să aducem vectori de la forma $\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$ la forma $\begin{bmatrix} x' \\ 0 \end{bmatrix}$.

### 2.4.1 Reflexii. Transformarea Householder.

Căutăm o transformare $P$ astfel încât $Pv = ||v||e$, unde $e$ este un vector din baza canonică.

Pentru reflexie, ne alegem un vector $d$ care ne va da *direcția de reflexie*, $||d||_2 = 1$



$$\begin{aligned} v' &= proj_d(-v) = \frac{\langle v, d\rangle}{\langle d, d\rangle} d \\ v' &= -v^* dd = -dd^* v \implies \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Pv &= v - 2v' = v - 2dd^* v \\ P &= I - 2dd^* \end{aligned}$$

Iar în cazul în care $d$ nu are norma 1, ajungem la forma generală a reflectorului Householder, prin normalizare:

$$P = I - 2\frac{dd^T}{d^T d}$$

**Afirmație.** $P$ este ortogonală.

**Demonstrație.** $P^T P = (I - 2dd^*)^*(I - 2dd^*) = I - 2dd^* - 2dd^* + 4dd^* dd^* = I - 4dd^* + 4dd^* = I$. ■

**Cum găsim $d$ pentru a introduce 0-uri?**

Cum $P$ este ortognală, știm că $||Pv||_2 = ||v||_2$. Astfel, ne dorim ca $Pv = \pm||v||_2 e_1$.

$$\begin{aligned} v + d &= Pv \\ v + d &= \pm||v||_2 e_1 \\ d &= \pm||v||_2 e_1 - v, \text{cum semnul lui } d \text{ nu contează, alegem} \\ d &= v \pm ||v||_2 e_1 \end{aligned}$$

**Plus sau minus?** Răspunsul îl putem găsi efectuând puțină analiză numerică, fără a demonstra nimic formal de data asta. Plecăm de la următoarea întrebare: Este bine ca $Pv$ și $v$ să fie apropiate?

Știind că calculul numeric nu este perfect, putem presupune că nici reflexia nu va fi perfectă. Problema este că dacă **v** este deja foarte aproape de axe, e foarte posibil ca **Pv** să fie chiar mai departe de aceasta.

În schimb, dacă **v** și reflexia acestuia sunt depărtate, eroare poate fi neglijabilă.

Ne dorim ca $||v - \alpha||v||_2 e_1||_2$ să fie maximă, unde $\alpha = \pm 1$. Considerăm doar cazul numerelor reale.

$$\begin{aligned} ||v - \alpha||v||_2||_2 = (v - \alpha||v||_2 e_1)^T (v - \alpha||v||_2 e_1) &= (v - \alpha||v||_2 e_1)^T (v - \alpha||v||_2 e_1) \\ &= v^T v - 2\alpha||v||_2 v^T e_1 + \alpha^2 ||v||_2^2 e_1^T e_1 \\ &= v^T v - 2\alpha||v||_2 v_1 + ||v||_2^2 \end{aligned}$$

Cum $v^T v$ și $||v||_2^2$ sunt constante, trebuie să găsim maximul termenului $-\alpha||v||_2 v_1$, mai precis $-\alpha v_1$. Cum $\alpha$ poate fi doar 0 sau 1, rezultă imediat că $\alpha = -sign(v_1)$.

În figura de mai jos (figura 5), avem un grafic al $||A - QR||_2/||A||_2$. Au fost generate 1000 de teste, deci avem 1000 de puncte pe grafic. În fiecare test s-a generat o matrice 3x3 aleatorie iar prima sa coloană a fost înlocuită cu $\begin{bmatrix}1 & \delta & 0\end{bmatrix}^T$, unde $\delta$ lua 17 valori între $10^{-16}$ și 1. Cu albastru avem cazul când alegem semnul ca mai sus, iar cu roșu când alegem semnul opus.

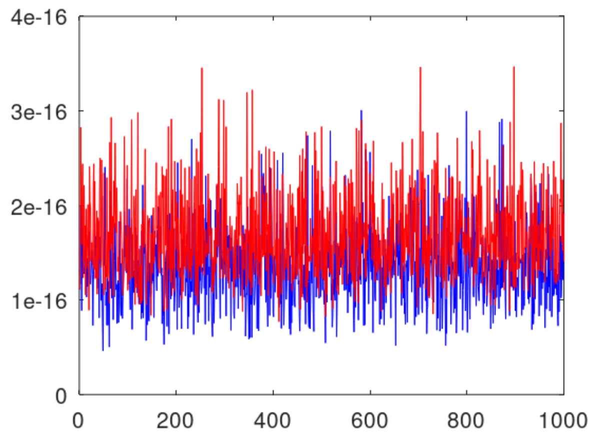



Figura 5: Eroarea relativă

Se poate observa că eroarea relativă, în medie, mai mică atunci când alegem semnul bine.

**Anulare catastrofală.** Având o precizie limitată în calculul numeric, se pare că diferența a două aproximari a unor numere foarte apropiate poate duce la o aproximare foarte rea.

**Demonstrație.** Fie aproximările $\overline{x}$ și $\overline{y}$, cu erorile relative $\epsilon_x = \frac{x-\overline{x}}{x}$ și $\epsilon_y = \frac{y-\overline{y}}{y}$.

$$\overline{x} = x(1+\epsilon_x)$$
$$\overline{y} = y(1+\epsilon_y)$$

Atunci,

$$\begin{aligned}\overline{x} - \overline{y} &= x(1+\epsilon_x) - y(1+\epsilon_y) = x - y + x\epsilon_x - y\epsilon_y \\ &= x - y + (x-y)\epsilon_{xy}, \text{unde } \epsilon_{xy} = \frac{x\epsilon_x - y\epsilon_y}{x-y} \\ &= (x-y)(1+\epsilon_{xy})\end{aligned}$$

Numitorul lui $\epsilon_{xy}$ este foarte mic daca $x \approx y$, deci eroarea devine foarte mare. ■

În concluzie, obținem următoarea formulă pentru $d$: $d = v + sign(v_1)||v||_2 e_1$.

Pentru a oferi un exemplu practic a descompunerii QR cu Householder, mai e utilă următoarea informație: putem "umple" vectorul $d$ cu 0-uri în locurile unde ne dorim ca vectorii să nu fie afectați. De exmeplu, dacă avem 3 dimensiuni și vrem să punem 0 **doar** pe poziția 3, atunci $d = \begin{bmatrix}0 \\ v2 - sign(v_2)||v'||_2 \\ v3\end{bmatrix}$ sau $d = \begin{bmatrix}v1 - sign(v_1)||v'||_2 \\ 0 \\ v3\end{bmatrix}$, unde $v' = \begin{bmatrix}v2 \\ v3\end{bmatrix}$, respectiv $v' = \begin{bmatrix}v1 \\ v3\end{bmatrix}$

**Exemplu.** Fie matricea $A_1 = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 5 \\ 1 & -1 & 1 \\ 2 & 1 & -1 \end{bmatrix}$. Ne dorim să găsim matricea $Q$ și $R$ astfel încât $A = QR$ și $Q$ să fie ortogonală.

La prima iterație ne dorim să punem 0-uri pe pozițiile (2, 1) și (3, 1).

$$v = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad ||v||_2 = 3, \quad d = \begin{bmatrix} 2 - sign(2) * 3 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad ||d||_2^2 = 6$$

$$H_1 = I_3 - 2\frac{dd^T}{d^Td} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{3}\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$H_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & -1 & -2 \\ -1 & 1 & 2 \\ -2 & 2 & 4 \end{bmatrix} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & -2 \\ 2 & -2 & -1 \end{bmatrix}$$

$$A_2 = H_1A_1 = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & -2 \\ 2 & -2 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 4 & 5 \\ 1 & -1 & 1 \\ 2 & 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

La a doua iterație ne dorim să punem 0 pe poziția (2, 3).

$$v = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad ||v||_2 = 3, \quad d = \begin{bmatrix} 0 \\ -sign(0) * 3 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -3 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad ||d||_2^2 = 18$$

$$H_2 = I_3 - 2\frac{dd^T}{d^Td} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{9}\begin{bmatrix} 0 \\ -3 \\ 3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -3 & 3 \end{bmatrix}$$

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{9}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & -9 \\ 0 & -9 & 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$A_3 = H_2A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 3 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 3 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 3 \\ 0 & -3 & -3 \\ 0 & 0 & -3 \end{bmatrix}$$

$A_3$ este matricea $R$, iar $Q = H_1^T H_2^T = H_1H_2$ este matricea ortogonală.

### 2.4.2 Rotații Givens

# 3 Probleme

# Referințe

[1] Michael L. Overton, Pinze Yu. On the choice of sign defining Householder transformations. Numerical Algebra, Control and Optimization, 2025, 15(2): 502-505. doi: 10.3934/naco.2023025