COMPLÉMENTS D'ALGÈBRE LINÉAIRE

Cours L2 - 2ème année - SPEM300

David Chiron



Table des matières

1	Pro	duit scalaire usuel et norme usuelle sur \mathbb{R}^N	
	1.1	Produit scalaire usuel et norme usuelle sur \mathbb{R}^N	
	1.2	Orthogonalité dans \mathbb{R}^N	
	1.3	Orthonormalisation d'une famille libre dans \mathbb{R}^N	12
	1.4	Endomorphisme autoadjoint	
	1.5	Projection orthogonale dans \mathbb{R}^N	
	1.6	Théorème de l'alternative	
2	Mét	thode des moindres carrés	23
	2.1	Système linéaire surdéterminé	23
	2.2	Système linéaire sousdéterminé	24
	2.3	Droite des moindres carrés	25
	2.4	Autres approximations au sens des moindres carrés et utilisations	28
3	Mat	trices orthogonales, isométries, et décompositions matricielles	33
	3.1	Matrices orthogonales, isométries	33
	3.2	Valeur propre, vecteur propre, sous-espace propre et théorème spectral	
	3.3	Analyse en composantes principales (ACP)	
	3.4	Décomposition QR d'une matrice	
	3.5	Décomposition en valeurs singulières (DVS)	
	3.6	Décomposition polaire	

Chapitre 1

Produit scalaire usuel et norme usuelle sur \mathbb{R}^N

Le plan étant rapporté à un repère orthonormé $(0, \vec{i}, \vec{j})$, on sait que si M a pour coordonnées (x_M, y_M) et si N a pour coordonnées (x_N, y_N) , alors on a les formules suivantes pour les normes et produit scalaire

$$OM = \sqrt{x_M^2 + y_M^2}, \qquad MN = \sqrt{(x_M - x_N)^2 + (y_M - y_N)^2}, \qquad \overrightarrow{OM} \cdot \overrightarrow{ON} = x_M x_N + y_M y_N.$$

Ces formules se généralisent à trois variables. L'objectif de ce premier chapitre est d'étendre ces définitions à un nombre quelconque (fini) de variables. On va donc se placer dans l'espace \mathbb{R}^N . Dans votre scolarité, vous avez vu d'abord la notion de perpendicularité, de distance, puis les angles (et les fonctions sin, cos), puis le produit scalaire. Ici, nous allons tout définir à partir du produit scalaire.

1.1 Produit scalaire usuel et norme usuelle sur \mathbb{R}^N

Définition 1.1. [Définition du produit scalaire usuel et de la norme usuelle sur \mathbb{R}^N] Soit $u = (u_1, \dots, u_N)$, $v = (v_1, \dots, v_N) \in \mathbb{R}^N$. On appelle produit scalaire de u et v le réel

$$u \cdot v = \sum_{j=1}^{N} u_j v_j.$$

On rencontre aussi les notations $\langle u|v\rangle$, (u,v), (u|v). La norme de u est définie comme le réel

$$||u|| = \sqrt{\sum_{j=1}^{N} u_j^2} = \sqrt{u \cdot u}.$$

Lorsque les vecteurs de \mathbb{R}^N sont écrits sous forme de matrices colonnes, le produit scalaire se définit comme suit.

Définition 1.2. [Définition du produit scalaire usuel et de la norme usuelle sur $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$] On considère $U = (U_{i,1})_{1 \leq i \leq N}, \ V = (V_{i,1})_{1 \leq i \leq N} \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$. On appelle produit scalaire de U et V le réel

$$U \cdot V = U^T V = \sum_{i=1}^{N} U_{i,1} V_{i,1}.$$

La norme de U est définie comme le réel

$$||U|| = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} U_{i,1}^2} = \sqrt{U \cdot U} = \sqrt{U^T U}.$$

Proposition 1.3. Le produit scalaire sur \mathbb{R}^N vérifie les propriétés suivantes :

- (i) [symétrie] pour tous $u, v \in \mathbb{R}^N$, $u \cdot v = v \cdot u$.
- (ii) [linéarité à gauche et à droite] pour tous $u, v, w \in \mathbb{R}^N$ et tout $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$,

$$(\lambda u + \mu v) \cdot w = \lambda(u \cdot w) + \mu(v \cdot w) \qquad et \qquad u \cdot (\lambda v + \mu w) = \lambda(u \cdot v) + \mu(u \cdot w).$$

Preuve. (i) La symétrie est évidente puisque $u_j v_j = v_j u_j$ quel que soit $1 \leq j \leq N$.

(ii) On a, par linéarité de la somme,

$$(\lambda u + \mu v) \cdot w = \sum_{j=1}^{N} (\lambda u_j + \mu v_j) w_j = \lambda \sum_{j=1}^{N} u_j w_j + \mu \sum_{j=1}^{N} v_j w_j = \lambda (u \cdot w) + \mu (v \cdot w),$$

comme souhaité. L'autre cas se traite de même ou en utilisant la symétrie.

Corollaire 1.4. Soit $r \in \mathbb{N}^*$, $s \in \mathbb{N}^*$ et (u_1, \ldots, u_r) , (v_1, \ldots, v_s) deux familles de r et s vecteurs de \mathbb{R}^N . Alors,

$$\left(\sum_{j=1}^{r} u_j\right) \cdot \left(\sum_{k=1}^{s} v_k\right) = \sum_{\substack{1 \le j \le r \\ 1 \le k \le s}} u_j \cdot v_k.$$

Preuve. Il suffit de procéder par récurrence sur $n=r+s\geqslant 2$, le résultat étant évidemment vrai pour r+s=2, c'est-à-dire r=s=1. Supposons-le vrai jusqu'au rang $n\geqslant 2$ et montrons-le pour n+1. Soit donc (u_1,\ldots,u_r) et (v_1,\ldots,v_s) deux familles de r et s vecteurs de \mathbb{R}^N , avec r+s=n+1. Comme $r+s=n+1\geqslant 3$, l'un, au moins, des deux entiers r ou s est s 2. Quitte à échanger les rôles de s et s, on peut supposer s 2. On a alors, en utilisant la linéarité à gauche du produit scalaire,

$$\left(\sum_{j=1}^{r} u_j\right) \cdot \left(\sum_{k=1}^{s} v_k\right) = \left(\left[\sum_{j=1}^{r-1} u_j\right] + u_r\right) \cdot \left(\sum_{k=1}^{s} v_k\right)$$
$$= \left(\sum_{j=1}^{r-1} u_j\right) \cdot \left(\sum_{k=1}^{s} v_k\right) + u_r \cdot \left(\sum_{k=1}^{s} v_k\right).$$

Pour le premier produit scalaire, on a (r-1) + s = r + s - 1 = n, donc on peut lui appliquer l'hypothèse de récurrence. Pour le second produit scalaire, on a 1 + s < r + s = n + 1, donc on peut également lui appliquer l'hypothèse de récurrence. On obtient alors

$$\left(\sum_{j=1}^r u_j\right) \cdot \left(\sum_{k=1}^s v_k\right) = \sum_{\substack{1 \leqslant j \leqslant r-1 \\ 1 \leqslant k \leqslant s}} u_j \cdot v_k + \sum_{k=1}^s u_r \cdot v_k = \sum_{\substack{1 \leqslant j \leqslant r \\ 1 \leqslant k \leqslant s}} u_j \cdot v_k,$$

comme voulu.

Proposition 1.5. La norme et le produit scalaire sont liés par les relations suivantes :

(i) [formule d'Al-Kashi=formule de Pythagore généralisée=loi des cosinus] pour tous $u, v \in \mathbb{R}^N$, on a

$$||u + v||^2 = ||u||^2 + ||v||^2 + 2u \cdot v;$$

(ii) [égalité du parallélogramme] pour tous $u, v \in \mathbb{R}^N$, on a

$$||u + v||^2 + ||u - v||^2 = 2(||u||^2 + ||v||^2)$$
:

(iii) [formule de polarisation] pour tous $u, v \in \mathbb{R}^N$, on a

$$4u \cdot v = \|u + v\|^2 - \|u - v\|^2$$

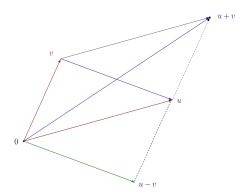


FIGURE 1.1 – Pour le parallélogramme de sommets 0, u, v et u+v, l'égalité du parallélogramme traduit que la somme des carrés des longueurs des deux diagonales (en bleu) est égale à la somme des carrés des longueurs des quatre côtés, c'est-à-dire deux fois la somme des carrés des longueurs en rouge.

Preuve. (i) s'obtient à partir du corollaire 1.4 :

$$||u + v||^2 = (u + v) \cdot (u + v) = u \cdot u + v \cdot u + u \cdot v + v \cdot v = ||u||^2 + ||v||^2 + 2u \cdot v,$$

par symétrie du produit scalaire.

(ii) et (iii) De (i), on a

$$||u + v||^2 = ||u||^2 + ||v||^2 + 2u \cdot v$$

et, de même,

$$||u - v||^2 = ||u||^2 + ||v||^2 - 2u \cdot v.$$

Il ne reste plus qu'à sommer (pour (ii)) et à faire la différence (pour (iii)).

Théorème 1.6. [Inégalité de Cauchy(-Schwarz)] Pour tous $u, v \in \mathbb{R}^N$, on a

$$|u \cdot v| \le ||u|| \times ||v||.$$

De plus, l'inégalité est stricte sauf si u et v sont colinéaires, c'est-à-dire sauf s'il existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tel que $u = \lambda v$ ou $v = \lambda u$.

Preuve 1 (Cauchy, 1821). Le point de départ est l'identité de Lagrange (1773)

$$\frac{1}{2} \sum_{1 \leq j,k \leq N} (u_j v_k - u_k v_j)^2 = \sum_{1 \leq j < k \leq N} (u_j v_k - u_k v_j)^2 = \left(\sum_{j=1}^N u_j^2\right) \left(\sum_{j=1}^N v_j^2\right) - \left(\sum_{j=1}^N u_j v_j\right)^2.$$

En effet,

$$\begin{split} \sum_{1\leqslant j,k\leqslant N} (u_jv_k - u_kv_j)^2 &= \sum_{1\leqslant j,k\leqslant N} (u_j^2v_k^2 + u_k^2v_j^2 - 2u_jv_ku_kv_j) \\ &= \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (u_j^2v_k^2) + \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (u_k^2v_j^2) - 2\sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N (u_jv_ku_kv_j) \\ &= \sum_{j=1}^N \left[u_j^2 \Big(\sum_{k=1}^N v_k^2 \Big) \right] + \sum_{j=1}^N \left[v_j^2 \Big(\sum_{k=1}^N u_k^2 \Big) \right] - 2\sum_{j=1}^N \Big((u_jv_j) \sum_{k=1}^N (v_ku_k) \Big). \\ &= 2\Big(\sum_{j=1}^N u_j^2 \Big) \Big(\sum_{k=1}^N v_k^2 \Big) - 2\Big(\sum_{j=1}^N (u_jv_j) \Big)^2. \end{split}$$

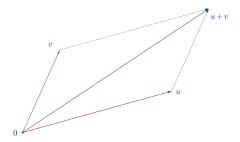


FIGURE 1.2 – Pour le parallélogramme de sommets 0, u, v et u+v, l'inégalité triangulaire dit que la somme de la longueur en rouge et de la longueur en vert est supérieure à la longueur en bleu.

Il est clair que le membre de gauche est positif, ce qui donne l'inégalité de Cauchy(-Schwarz) $(u \cdot v)^2 \le$ $||u||^2||v||^2$.

S'il y a égalité, alors on a, pour $1 \leq j, k \leq N, u_j v_k - u_k v_j = 0$. Si u = 0, on a bien égalité et u et v sont bien colinéaires (avec $\lambda=0$). Si $u\neq 0$, c'est que l'une de ses composantes, disons u_{j_0} , n'est pas nulle. On a alors, pour $1\leqslant k\leqslant N,\,u_{j_0}v_k=u_kv_{j_0}$, ou encore $v_k=\frac{v_{j_0}}{u_{j_0}}u_k$, c'est-à-dire $v=\lambda u$ avec $\lambda=\frac{v_{j_0}}{u_{j_0}}$. Les vecteurs u et v sont donc bien colinéaires. La réciproque est claire : si u et v sont colinéaires, disons $u=\lambda v$, alors $u \cdot v = (\lambda v) \cdot v = \lambda(v \cdot v)$, d'où $|u \cdot v| = |\lambda| \times ||v||^2$ et $||u|| \times ||v|| = ||\lambda v|| \times ||v|| = |\lambda| \times ||v||^2$. Preuve 2 (H. Schwarz, 1888). Si u=0, l'inégalité est vraie et est une égalité. Supposons ensuite $u\neq 0$. Pour

$$\|\lambda u + v\|^2 = \lambda^2 \|u\|^2 + 2\lambda u \cdot v + \|v\|^2.$$

Or, le membre de gauche est positif quel que soit $\lambda \in \mathbb{R}$, donc le trinôme ($\|u\|^2 > 0$) $\lambda^2 \|u\|^2 + 2\lambda u \cdot v + \|v\|^2$ en λ a soit deux racines complexes conjuguées non réelles (cas $\Delta < 0$) ou une racine réelle double (cas $\Delta = 0$). Dans tous les cas, $\Delta \leq 0$, ce qui donne

$$0 \geqslant \Delta = (2u \cdot v)^2 - 4||u||^2||v||^2$$

et l'inégalité de Cauchy.

 $\lambda \in \mathbb{R}$, on a

Remarque 1.7. L'identité de J. L. Lagrange date de 1773 pour N=3. La preuve de A. L. Cauchy de 1821 de cette inégalité est celle donnée ici. En 1888, H. Schwarz donne une extension au cas des intégrales et étudie le cas d'égalité. Sa preuve avec le discriminant est aussi celle donnée ici.

Proposition 1.8. La norme sur \mathbb{R}^N vérifie les propriétés suivantes :

- (i) [séparation] pour tout $u \in \mathbb{R}^N$, $||u|| \ge 0$ et l'égalité n'a lieu que si u = 0; (ii) [homogénéité] pour tout $u \in \mathbb{R}^N$ et tout $\lambda \in \mathbb{R}$, on a $||\lambda u|| = |\lambda| \times ||u||$;
- (iii) [inégalité triangulaire] pour tous $u, v \in \mathbb{R}^N$, on a

$$||u+v|| \le ||u|| + ||v||,$$

et l'inégalité est stricte sauf si u et v sont positivement liés, c'est-à-dire sauf s'il existe $\lambda \geqslant 0$ tel que $u = \lambda v$ ou $v = \lambda u$.

Preuve. (i) est évident. Pour (ii), il suffit d'écrire

$$\|\lambda u\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{r} (\lambda u_j)^2} = \sqrt{\lambda^2 \sum_{j=1}^{r} u_j^2} = |\lambda| \times \|u\|.$$

Montrons enfin (iii). On a

$$||u+v||^2 = ||u||^2 + ||v||^2 + 2u \cdot v \le ||u||^2 + ||v||^2 + 2|u \cdot v| \le ||u||^2 + ||v||^2 + 2||u|| \times ||v||$$

par l'inégalité de Cauchy(-Schwarz). Le membre de droite est $(\|u\| + \|v\|)^2$, d'où le résultat en prenant la racine carrée.

Si l'on veut avoir égalité, il faut que $u \cdot v = |u \cdot v|$ soit positif et que l'inégalité de Cauchy(-Schwarz) soit une égalité, ce qui veut dire qu'il existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tel que $u = \lambda v$ ou $v = \lambda u$. La contrainte $u \cdot v \geqslant 0$ impose alors $\lambda \geqslant 0$ (le cas où u = 0 ou v = 0 étant évident).

Définition 1.9. [Vecteur normé/unitaire] Un vecteur $u \in \mathbb{R}^N$ est dit normé ou unitaire si ||u|| = 1. De $m\hat{e}me, U \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ est dite normée ou unitaire si ||U|| = 1.

Il est clair que si $u \in \mathbb{R}^N$ n'est pas nul, alors $\frac{u}{\|u\|}$ est unitaire et engendre la même droite que u.

Définition 1.10. [Boules et sphères] Soit $R \ge 0$ et $a \in \mathbb{R}^N$. On appelle

- (i) boule ouverte de centre a et de rayon R > 0 l'ensemble $B(a,R) = \{u \in \mathbb{R}^N \ t.q. \ ||u-a|| < R\}.$
- (ii) boule fermée de centre a et de rayon R l'ensemble $\bar{B}(a,R) = \{u \in \mathbb{R}^N \ t.q. \ ||u-a|| \leqslant R\}.$
- (iii) sphère de centre a et de rayon R > 0 l'ensemble $S(a,R) = \{u \in \mathbb{R}^N \ t.q. \ ||u a|| = R\}$.

Orthogonalité dans \mathbb{R}^N 1.2

Définition 1.11. [Vecteurs orthogonaux, orthogonal d'une partie, sous-espaces orthogonaux]

- (i) Deux vecteurs $u, v \in \mathbb{R}^N$ sont dits orthogonaux si $u \cdot v = 0$ (dans ce cas, on a aussi $v \cdot u = 0$). On note alors $u \perp v$.
- (ii) Si $A \subset \mathbb{R}^N$, on définit l'orthogonal de A (dans \mathbb{R}^N) comme

$$A^{\perp} = \{ v \in \mathbb{R}^N \ t.q. \ a \cdot v = 0 \ quel \ que \ soit \ a \in A \}.$$

(iii) Deux sous-espaces vectoriels F et G de \mathbb{R}^N sont dits orthogonaux, ce que l'on note $F \perp G$, si, quels que soient $x \in F$ et $y \in G$, on a $x \perp y$.

Proposition 1.12. Si $A \subset \mathbb{R}^N$, alors l'orthogonal A^{\perp} de A est un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N .

Preuve. En effet, $A^{\perp} \subset \mathbb{R}^N$, $0 \in A^{\perp}$ (car pour tout $a \in A$, on a $0 \cdot a = 0$). De plus, si $u, v \in A^{\perp}$ et si λ , $\mu \in \mathbb{R}$, alors $\lambda u + \mu v \in A^{\perp}$ car, pour tout $a \in A$, on a $a \cdot (\lambda u + \mu v) = \lambda a \cdot u + \mu a \cdot v = 0$ par linéarité du produit scalaire.

Exemple 1.13. (i) Dans \mathbb{R}^2 , les vecteurs (1, -4) et (4, 1) sont orthogonaux car $(1, -4) \cdot (4, 1) = 4 + (-4) = 0$. On a donc $(1, -4) \perp (4, 1)$. Voir la figure 1.3 gauche.

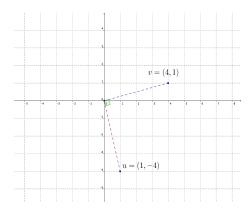
- (ii) Dans \mathbb{R}^2 , l'orthogonal de $A = \{(-1,2)\}$ est la droite d'équation y = x/2. En effet, pour $u = (x,y) \in \mathbb{R}^2$, on a $u \in A^{\perp} \Leftrightarrow u \cdot (-1,2) = 0 \Leftrightarrow -x + 2y = 0$. Voir la figure 1.3 droite. (iii) Dans \mathbb{R}^N , on a $\{0\}^{\perp} = \mathbb{R}^N$. En effet, pour tout $u \in \mathbb{R}^N$, on a $u \cdot 0 = 0$. Ainsi, on a bien $\mathbb{R}^N \subset \{0\}^{\perp} \subset \mathbb{R}^N$.
- (iv) Dans \mathbb{R}^N , on a $(\mathbb{R}^N)^{\perp} = \{0\}$. En effet, soit $u \in (\mathbb{R}^N)^{\perp} \subset \mathbb{R}^N$. Alors, u est orthogonal à lui-même, c'est-à-dire $0 = u \cdot u = ||u||^2$, donc u = 0. Comme un orthogonal contient toujours 0 (c'est un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N), on a bien $(\mathbb{R}^N)^{\perp} = \{0\}$.

Plus généralement, si F est un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N , on a $F \cap F^{\perp} = \{0\}$.

Théorème 1.14. [Théorème de Pythagore] Soit $u, v \in \mathbb{R}^N$. Alors on a équivalence entre

- (i) u et v sont orthogonaux;
- $(ii) \|u + v\|^2 = \|u\|^2 + \|v\|^2.$

Preuve. C'est une conséquence immédiate de la proposition 1.5 (i).



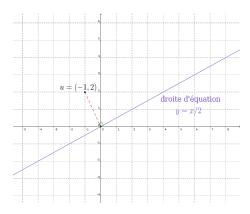


FIGURE 1.3 – Orthogonalité dans \mathbb{R}^2 : à gauche, les vecteurs u et v sont orthogonaux; à droite, la droite violette d'équation y = x/2 est l'orthogonal de $\{(-1,2)\}$.

Définition 1.15. [Angle entre deux vecteurs] Soit $u, v \in \mathbb{R}^N$ non nuls. On appelle angle entre u et v le nombre

 $\theta = \arccos\left(\frac{u \cdot v}{\|u\| \times \|v\|}\right) \in [0, \pi].$

Cela a un sens car l'inégalité de Cauchy donne $|u \cdot v| \leq ||u|| \times ||v||$, donc $\frac{u \cdot v}{||u|| \times ||v||} \in [-1, +1]$, et on se rappelle que $\arccos: [-1, +1] \to [0, \pi]$.

On a $\theta=0$ lorsque u et v sont colinéaires et de même sens (c'est-à-dire $u=\lambda v$ avec $\lambda>0$); on a $\theta=\pi$ lorsque u et v sont colinéaires et de sens opposés (c'est-à-dire $u=\lambda v$ avec $\lambda<0$); et on a $\theta=\pi/2$ lorsque u et v sont orthogonaux.

Exemple 1.16. On cherche l'angle entre les deux vecteurs de \mathbb{R}^3

$$u = (1, 1, 1)$$
 et $v = (2, -1, 0)$.

Voir la figure 1.4. On a

$$||u|| = \sqrt{3}, \quad ||v|| = \sqrt{5} \quad \text{et} \quad u \cdot v = 1,$$

donc l'angle entre u et v vaut

$$\arccos\left(\frac{u\cdot v}{\|u\|\times\|v\|}\right) = \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{15}}\right) \approx 1,309(6) \text{ radians} = 75,03(6) \text{ degrés}.$$

Proposition 1.17. Pour $u, v \in \mathbb{R}^N$ non nuls, on a $u \cdot v = ||u|| \times ||v|| \times \cos \theta$, où θ est l'angle entre u et v.

Preuve. On a $\cos\arccos(x)=x$ pour $x\in[-1,+1]$, donc $\cos\theta=\frac{u\cdot v}{\|u\|\times\|v\|}$. On retrouve la formule du produit scalaire vue comme définition en lycée.

Proposition 1.18. (i) Si $A \subset B \subset \mathbb{R}^N$, on a $B^{\perp} \subset A^{\perp}$.

- (ii) Si $A \subset \mathbb{R}^N$, on a $A^{\perp} = [\operatorname{Vect} A]^{\perp}$.
- (iii) Si F et G sont des sous-espaces vectoriels de \mathbb{R}^N , alors 1 $(F+G)^{\perp}=F^{\perp}\cap G^{\perp}$.

Preuve. (i) Supposons $A \subset B \subset \mathbb{R}^N$, et prenons $u \in B^{\perp}$. On a alors, pour tout $a \in A$, $a \cdot u = 0$ puisque $a \in A \subset B$. Donc, $u \in A^{\perp}$.

^{1.} On rappelle que, si F et G sont deux sous-espaces vectoriels de \mathbb{R}^N , on note $F+G=\{x+y|x\in F,\,y\in G\}$.

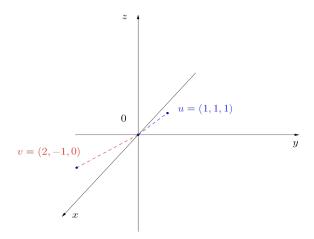


FIGURE 1.4 – Calcul de l'angle entre deux vecteurs de \mathbb{R}^3 .

(ii) Comme $A \subset \operatorname{Vect} A \subset \mathbb{R}^N$, on a $[\operatorname{Vect} A]^{\perp} \subset A^{\perp}$ par (i). Soit ensuite $u \in A^{\perp}$ et $x \in \operatorname{Vect} A$. Il existe donc $r \in \mathbb{N}^*$ et $a_1, \ldots, a_r \in A$ ainsi que $\lambda_1, \ldots, \lambda_r \in \mathbb{R}$ tels que $x = \sum_{j=1}^r \lambda_j a_j$. Par conséquent, par linéarité à droite du produit scalaire,

$$u \cdot x = u \cdot \left(\sum_{j=1}^{r} \lambda_j a_j\right) = \sum_{j=1}^{r} \lambda_j u \cdot a_j = 0$$

car $u \cdot a_j = 0$ quel que soit $1 \leq j \leq r$. Cela montre que $u \in [\text{Vect } A]^{\perp}$.

(iii) On procède par double inclusion. Tout d'abord, $F \subset F + G$, donc $(F+G)^{\perp} \subset F^{\perp}$ par (i). De même, $(F+G)^{\perp} \subset G^{\perp}$. On en déduit que $(F+G)^{\perp} \subset F^{\perp} \cap G^{\perp}$. Ensuite, on considère $u \in F^{\perp} \cap G^{\perp}$ et $v \in F + G$. Cela veut dire qu'il existe $f \in F$ et $g \in G$ tels que v = f + g. On a alors $u \cdot v = u \cdot (f+g) = u \cdot f + u \cdot g = 0$ puisque $u \in F^{\perp} \cap G^{\perp}$ est orthogonal à f et à g. On a donc bien $u \in (F+G)^{\perp}$.

Définition 1.19. [Famille orthogonale, famille orthonormée, base orthonormée] $Soit r \in \mathbb{N}^*$ et soit (u_1, \ldots, u_r) une famille de r vecteurs dans \mathbb{R}^N . Soit aussi F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N . On dit que la famille (u_1, \ldots, u_r) est

- (i) orthogonale si $u_j \cdot u_k = 0$ pour $1 \le j \ne k \le r$ (autrement dit, les vecteurs de la famille sont deux à deux orthogonaux);
- (ii) orthonormée $si^2 u_j \cdot u_k = \delta_{j,k}$ pour $1 \leq j \neq k \leq r$ (autrement dit la famille (u_1, \ldots, u_r) est orthogonale et ses vecteurs sont normés);
- (iii) une base orthonormée de F si elle est à la fois une base de F et une famille orthonormée.

Exemple 1.20. (i) Dans \mathbb{R}^3 , la famille $\mathcal{F} = (v_1, v_2)$, avec

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(1, 1, 2),$$
 $v_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}(-2, 0, 1)$

est orthonormée. En effet, $||v_1|| = ||v_2|| = 1$ et $v_1 \cdot v_2 = 0$.

(ii) Dans \mathbb{R}^N , la base canonique (e_1,\ldots,e_N) , où $e_k=(\delta_{j,k})_{1\leqslant j\leqslant N}$, est une base orthonormée de \mathbb{R}^N . En effet, pour $1\leqslant k,\ell\leqslant N,\ e_k\cdot e_\ell=\sum_{j=1}^N\delta_{j,k}\delta_{j,\ell}=\delta_{k,\ell}.$

Proposition 1.21. [Pythagore pour une somme] (i) Soit $r \in \mathbb{N}^*$ et (u_1, \ldots, u_r) une famille orthogonale dans \mathbb{R}^N . Alors,

$$\left\| \sum_{j=1}^{r} u_j \right\|^2 = \sum_{j=1}^{r} \|u_j\|^2.$$

^{2.} $\delta_{j,k}$ désigne le symbole de Kronecker de j et k, valant 1 si j=k et 0 si $j\neq k$.

(ii) Soit $r \in \mathbb{N}^*$ et (u_1, \ldots, u_r) une famille orthonormée dans \mathbb{R}^N . Alors, pour tout $(\alpha_1, \ldots, \alpha_r) \in \mathbb{R}^r$, on a

$$\left\| \sum_{j=1}^r \alpha_j u_j \right\|^2 = \sum_{j=1}^r \alpha_j^2.$$

Preuve. (i) On applique le corollaire 1.4:

$$\left\| \sum_{j=1}^{r} u_j \right\|^2 = \left(\sum_{j=1}^{r} u_j \right) \cdot \left(\sum_{k=1}^{r} u_k \right) = \sum_{j,k=1}^{r} u_j \cdot u_k = \sum_{j=1}^{r} u_j \cdot u_j = \sum_{j=1}^{r} \|u_j\|^2$$

car les produits scalaires $u_j \cdot u_k$ sont nuls si $j \neq k$ par orthogonalité de (u_1, \ldots, u_r) .

(ii) On applique (i) à la famille $(\alpha_1 u_1, \dots, \alpha_r u_r)$, qui est orthogonale :

$$\left\| \sum_{j=1}^{r} \alpha_{j} u_{j} \right\|^{2} = \sum_{j=1}^{r} \|\alpha_{j} u_{j}\|^{2} = \sum_{j=1}^{r} \alpha_{j}^{2}$$

par homogénéité et car les u_i sont normés.

Proposition 1.22. (i) Toute famille orthonormée dans \mathbb{R}^N est libre, donc, en particulier, de cardinal $\leq N$. (ii) Une famille orthonormée de N vecteurs de \mathbb{R}^N est une base orthonormée de \mathbb{R}^N .

 $\alpha_r u_r = 0$. On prend le produit scalaire avec u_k pour $1 \leqslant k \leqslant r$ donné. Cela donne

$$0 = u_k \cdot (\alpha_1 u_1 + \ldots + \alpha_r u_r) = \alpha_1 u_k \cdot u_1 + \ldots + \alpha_r u_k \cdot u_r = \alpha_k$$

puisque (u_1, \ldots, u_r) est orthonormée, donc les termes $u_k \cdot u_j$ valent 0 (si $j \neq k$) ou 1 (quand j = k). On en conclut que $\alpha_1 = \ldots = \alpha_r = 0$. Ainsi, la famille (u_1, \ldots, u_r) est libre.

Preuve 2. Soit (u_1, \ldots, u_r) une famille orthonormée et considérons $(\alpha_1, \ldots, \alpha_r)$ des réels tels que $\alpha_1 u_1 + \ldots + \alpha_r$ $\alpha_r u_r = 0$. On prend la norme au carré et on utilise la proposition 1.21 (ii), ce qui est possible car la famille (u_1,\ldots,u_r) est orthonormée :

$$0 = \|\alpha_1 u_1 + \ldots + \alpha_r u_r\|^2 = \alpha_1^2 + \ldots + \alpha_r^2.$$

Par conséquent, $\alpha_1 = \ldots = \alpha_r = 0$. Ainsi, la famille (u_1, \ldots, u_r) est libre. Toute famille libre dans \mathbb{R}^N est de cardinal $\leq N = \dim(\mathbb{R}^N)$, et si son cardinal est N, c'est une base (qui est donc une base orthonormée) de \mathbb{R}^N .

Exemple 1.23. Dans \mathbb{R}^3 , la famille $\mathcal{F} = (v_1, v_2, v_3)$, avec

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(1, 1, 2),$$
 $v_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}(-2, 0, 1),$ $v_3 = \frac{1}{\sqrt{30}}(1, -5, 2)$

est orthonormée. En effet, $||v_1|| = ||v_2|| = ||v_3|| = 1$ et $v_1 \cdot v_2 = v_2 \cdot v_3 = v_1 \cdot v_3 = 0$.

Comme cette famille est de cardinal $3 = \dim(\mathbb{R}^3)$, il s'agit d'une base orthonormée de \mathbb{R}^3 .

Proposition 1.24. Soit F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N et (b_1, \ldots, b_r) une base orthonormée de F. (i) Pour tout $u \in F$, on a

$$u = \sum_{j=1}^{\tau} (u \cdot b_j) b_j.$$

(ii) Pour tout $u \in \mathbb{R}^N$, on a

$$u - \sum_{j=1}^{r} (u \cdot b_j) b_j \in F^{\perp}.$$

Preuve. (i) On sait que u se décompose en $\sum_{j=1}^r \alpha_j b_j$ pour des réels $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ car (b_1, \ldots, b_r) est une base de F. On prend le produit scalaire avec b_k pour $1 \le k \le r$ donné. Cela donne

$$u \cdot b_k = (\alpha_1 b_1 + \ldots + \alpha_r b_r) \cdot b_k = \alpha_1 b_1 \cdot b_k + \ldots + \alpha_r b_r \cdot b_k = \alpha_k$$

par linéarité du produit scalaire et orthonormalité de la famille (b_1, \ldots, b_r) .

(ii) Par la proposition 1.18, comme $F = \text{Vect}(b_1, \dots, b_r)$, il suffit de vérifier que pour tout $1 \leqslant k \leqslant r$, $u - \sum_{j=1}^{r} (u \cdot b_j) b_j$ est orthogonal à b_k . Or,

$$\left(u - \sum_{j=1}^{r} (u \cdot b_j)b_j\right) \cdot b_k = u \cdot b_k - \sum_{j=1}^{r} (u \cdot b_j) \times (b_j \cdot b_k) = u \cdot b_k - u \cdot b_k = 0$$

toujours par linéarité du produit scalaire et orthonormalité de la famille (b_1, \ldots, b_r) .

Le corollaire suivant est très important. Il permet de décomposer très facilement un vecteur de \mathbb{R}^N dans une base orthonormée : il suffit de calculer N produits scalaires, ce qui est nettement moins fastidieux que de résoudre un système linéaire $N \times N$.

Corollaire 1.25. [Décomposition dans une base orthonormée] $Si(b_1, ..., b_N)$ est une base orthonormée de \mathbb{R}^N , alors, quels que soient $u, v \in \mathbb{R}^N$, on a

$$u = \sum_{k=1}^{N} (u \cdot b_k) b_k, \qquad ||u||^2 = \sum_{k=1}^{N} (u \cdot b_k)^2$$

et

$$u \cdot v = \sum_{k=1}^{N} (u \cdot b_k) \times (v \cdot b_k).$$

Preuve. La première assertion est la proposition 1.24 (i) avec $F = \mathbb{R}^N$ dont (b_1, \ldots, b_N) est une base orthonormée. La deuxième assertion découle alors de la proposition 1.21 (ii). Il nous reste à écrire

$$u \cdot v = \left(\sum_{k=1}^{N} (u \cdot b_k) b_k\right) \cdot v = \sum_{k=1}^{N} (u \cdot b_k) \times (b_k \cdot v)$$

pour montrer la troisième assertion.

Exemple 1.26. Prenons la base orthonormée

$$\mathcal{F} = (v_1, v_2, v_3) = \left(\frac{1}{\sqrt{6}}(1, 1, 2), \frac{1}{\sqrt{5}}(-2, 0, 1), \frac{1}{\sqrt{30}}(1, -5, 2)\right)$$

de \mathbb{R}^3 de l'exemple 1.23 et u=(1,2,1). La décomposition de u sur la base \mathcal{F} est donnée par

$$u = (u \cdot v_1)v_1 + (u \cdot v_2)v_2 + (u \cdot v_3)v_3 = \frac{5}{\sqrt{6}}v_1 - \frac{1}{\sqrt{5}}v_2 - \frac{7}{\sqrt{30}}v_3.$$

Essayez de calculer les coefficients $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ en résolvant le système linéaire 3×3 associé à l'équation $\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \alpha_3 v_3 = (1, 2, 1)$, et vous verrez l'intérêt de travailler dans une base orthonormée.

1.3 Orthonormalisation d'une famille libre dans \mathbb{R}^N

Soit $r \in \mathbb{N}^*$ et (u_1, \ldots, u_r) une famille libre. On souhaite construire une famille orthonormée (b_1, \ldots, b_r) telle que $\text{Vect}(u_1) = \text{Vect}(b_1)$, $\text{Vect}(u_1, u_2) = \text{Vect}(b_1, b_2)$, ... et enfin $\text{Vect}(u_1, \ldots, u_r) = \text{Vect}(b_1, \ldots, b_r)$.

Pour que b_1 soit unitaire et que $\text{Vect}(u_1) = \text{Vect}(b_1)$, un choix naturel est de normer u_1 (non nul, sinon (u_1, \ldots, u_r) serait liée) et de poser

$$b_1 = \frac{u_1}{\|u_1\|}.$$

Le seul autre choix possible est $b_1 = -\frac{u_1}{\|u_1\|}$.

On souhaite ensuite avoir $\text{Vect}(u_1, u_2) = \text{Vect}(b_1, b_2)$ avec (b_1, b_2) orthonormée. On commence par observer que la proposition 1.24 (ii) assure que $u'_2 = u_2 - (u_2 \cdot b_1)b_1$ est orthogonal à b_1 (et à u_1) et que $\text{Vect}(u_1, u_2) = \text{Vect}(b_1, u'_2)$. La famille (b_1, u'_2) est donc une base orthogonale de $\text{Vect}(u_1, u_2)$, avec b_1 normé mais pas u'_2 . Le vecteur u'_2 n'est pas nul, sinon $\text{Vect}(u_1, u_2) = \text{Vect}(b_1, u'_2)$ ne serait pas de dimension 2. On pose donc

$$b_2 = \frac{u_2'}{\|u_2'\|}.$$

On souhaite ensuite avoir $\text{Vect}(u_1, u_2, u_3) = \text{Vect}(b_1, b_2, b_3)$ avec (b_1, b_2, b_3) orthonormée. Toujours par la proposition 1.24 (ii), $u'_3 = u_3 - (u_3 \cdot b_1)b_1 - (u_3 \cdot b_2)b_2$ est orthogonal à b_1 et à b_2 et on a $\text{Vect}(u_1, u_2, u_3) = \text{Vect}(b_1, b_2, u'_3)$. La famille (b_1, b_2, u'_3) est donc une base orthogonale de $\text{Vect}(u_1, u_2, u_3)$, avec b_1 et b_2 normés mais pas u'_3 . Là encore, le vecteur u'_3 n'est pas nul, sinon $\text{Vect}(u_1, u_2, u_3) = \text{Vect}(b_1, b_2, u'_3)$ ne serait pas de dimension 3. On pose donc

$$b_3 = \frac{u_3'}{\|u_3'\|}.$$

On poursuit ainsi jusqu'à avoir pris u_r .

Théorème 1.27. [Théorème d'orthonormalisation de Gram-Schmidt] Soit $r \in \mathbb{N}^*$ et (u_1, \ldots, u_r) une famille libre dans \mathbb{R}^N . On définit successivement

$$\begin{cases} b_1 = \frac{u_1}{\|u_1\|} \\ u'_2 = u_2 - (u_2 \cdot b_1)b_1 \\ b_2 = \frac{u'_2}{\|u'_2\|} \\ u'_3 = u_3 - (u_3 \cdot b_1)b_1 - (u_3 \cdot b_2)b_2 \\ b_3 = \frac{u'_3}{\|u'_3\|} \\ \cdots = \cdots \\ u'_r = u_r - (u_r \cdot b_1)b_1 - (u_r \cdot b_2)b_2 - \cdots - (u_r \cdot b_{r-1})b_{r-1} \\ b_r = \frac{u'_r}{\|u'_r\|}. \end{cases}$$

Alors, (b_1, \ldots, b_r) est une base orthonormée de $Vect(u_1, \ldots, u_r)$.

Remarque 1.28. La méthode ci-dessus a été proposée par E. Schmidt en 1907 ([14]). Il fait référence à un travail antérieur de J. P. Gram issu de sa thèse ([4]) en 1879 et publié [5] en 1883. On pourra trouver dans [10] d'autres informations sur l'histoire de ce procédé.

Remarque 1.29. Si l'on prend les vecteurs (u_1, \ldots, u_r) dans un ordre différent de l'ordre naturel, on obtiendra toujours une base orthonormée de $\text{Vect}(u_1, \ldots, u_r)$, mais qui sera différente.

Parfois, on ne souhaite pas avoir une famille orthonormée mais on se contente d'une famille orthogonale.

Dans ce cas, on exécute

$$\begin{cases} u'_1 = u_1 \\ u'_2 = u_2 - \frac{(u_2 \cdot u'_1)}{\|u'_1\|^2} u'_1 \\ u'_3 = u_3 - \frac{(u_3 \cdot u'_1)}{\|u'_1\|^2} u'_1 - \frac{(u_3 \cdot u'_2)}{\|u'_2\|^2} u'_2 \\ \dots = \dots \\ u'_r = u_r - \frac{(u_r \cdot u'_1)}{\|u'_1\|^2} u'_1 - \frac{(u_r \cdot u'_2)}{\|u'_2\|^2} u'_2 - \dots - \frac{(u_r \cdot u'_{r-1})}{\|u'_{r-1}\|^2} u'_{r-1}. \end{cases}$$

Remarque 1.30. Si on applique la méthode ci-dessus à une famille (u_1, \ldots, u_r) liée, alors, on doit obtenir au moins une fois un vecteur u'_k nul. Dans ce cas, on peut retirer u_k de la famille car cela veut dire qu'il est combinaison linéaire des vecteurs u_1, \ldots, u_{k-1} précédents. On peut alors reprendre l'algorithme. Ce phénomène peut bien sûr arriver plusieurs fois. On obtient à la fin une famille (b_1, \ldots, b_s) avec s < r qui est une base orthonormée de $\mathrm{Vect}(u_1, \ldots, u_r)$.

Exemple 1.31. On considère, dans \mathbb{R}^3 , la famille

$$u_1 = (1, 1, 0),$$
 $u_2 = (1, 0, 2),$ $u_3 = (0, -1, 1).$

• Le vecteur u_1 n'est pas nul, et $||u_1|| = \sqrt{2}$. On pose donc

$$b_1 = \frac{u_1}{\|u_1\|} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 0).$$

• On calcule ensuite

$$u_2' = u_2 - (u_2 \cdot b_1)b_1 = (1, 0, 2) - \frac{1}{2}(u_2 \cdot u_1)(1, 1, 0) = (1/2, -1/2, 2),$$

qui n'est pas nul, puis $||u_2'||^2 = \frac{9}{2}$, et on pose

$$b_2 = \frac{u_2'}{\|u_2'\|} = \frac{\sqrt{2}}{3}(1/2, -1/2, 2) = \frac{\sqrt{2}}{6}(1, -1, 4).$$

• On calcule enfin

$$u_3' = u_3 - (u_3 \cdot b_2)b_2 - (u_3 \cdot b_1)b_1$$

= $(0, -1, 1) - \frac{2}{36}(0, -1, 1) \cdot (1, -1, 4)(1, -1, 4) - \frac{1}{2}(0, -1, 1) \cdot (1, 1, 0)(1, 1, 0) = \frac{1}{9}(2, -2, -1),$

qui n'est pas nul, puis $||u_3'||^2 = \frac{1}{9}$, et on pose

$$b_3 = \frac{u_3'}{\|u_3'\|} = \frac{1}{3}(2, -2, -1).$$

Comme on n'a pas obtenu de vecteur u'_k nul, cela veut dire que la famille (u_1, u_2, u_3) est libre, donc est base de \mathbb{R}^3 . Il s'ensuit que la famille (b_1, b_2, b_3) est une base orthonormée de \mathbb{R}^3 .

Corollaire 1.32. Tout sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N admet une base orthonormée³.

Preuve. On sait par le cours d'algèbre linéaire de 1ère année qu'un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N admet une base. Il suffit alors de l'orthonormaliser selon la méthode de Gram-Schmidt.

^{3.} L'espace {0} a pour base la famille vide, qui est bien orthonormée.

1.4 Endomorphisme autoadjoint

Nous allons maintenant introduire une classe d'endomorphisme de \mathbb{R}^N qui possèdent une propriété particulière vis-à-vis du produit scalaire.

Définition 1.33. [Endomorphisme de \mathbb{R}^N autoadjoint] Soit $f \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$. On dit que f est autoadjoint si, quels que soient $x, y \in \mathbb{R}^N$, on a $f(x) \cdot y = x \cdot f(y)$.

Exemple 1.34. L'application $f: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ donnée par $f(x) = f(x_1, x_2) = (2x_1 - 3x_2, x_2/2 - 3x_1)$, qui est manifestement linéaire, est autoadjointe, puisque, pour tous $x, y \in \mathbb{R}^2$, on a

$$f(x) \cdot y - x \cdot f(y) = \left[(2x_1 - 3x_2)y_1 + (x_2/2 - 3x_1)y_2 \right] - \left[(2y_1 - 3y_2)x_1 + (y_2/2 - 3y_1)x_2 \right] = 0.$$

Il y a un lien très fort entre endomorphisme autoadjoint et matrice symétrique ⁴. On rappelle qu'une matrice carrée A est dite symétrique si $A^T = A$, c'est-à-dire si, pour tous $1 \le i, j \le N$, on a $A_{i,j} = A_{j,i}$.

Proposition 1.35. [Caractérisation des endomorphismes autoadjoints] Soit $f \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$. Les assertions suivantes sont équivalentes :

- (i) l'endomorphisme f est autoadjoint;
- (ii) la matrice de l'endomorphisme f dans la base canonique de \mathbb{R}^N est symétrique;
- (iii) il existe une base orthonormée de \mathbb{R}^N dans laquelle la matrice de l'endomorphisme f est symétrique;
- (iv) la matrice de l'endomorphisme f dans toute base orthonormée de \mathbb{R}^N est symétrique.

Preuve. $(i) \Rightarrow (iv)$. On note $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_N)$ une base orthonormée quelconque de \mathbb{R}^N et A la matrice de f dans la base \mathcal{B} . Pour $1 \leqslant i, j \leqslant N$, on sait par le corollaire 1.25 que la décomposition de $f(b_j)$ sur la base \mathcal{B} de \mathbb{R}^N est

$$f(b_j) = \sum_{k=1}^{N} [f(b_j) \cdot b_k] b_k.$$

Donc $A_{i,j} = f(b_j) \cdot b_i$. Comme f est supposé autoadjoint, on a $A_{j,i} = f(b_i) \cdot b_j = b_j \cdot f(b_i) = A_{i,j}$. Ainsi, $A = A^T$ est bien symétrique.

 $(iv) \Rightarrow (iii)$. On sait qu'il existe au moins une base orthonormée de \mathbb{R}^N comme (cf. exemple 1.20 (ii)) la base canonique ⁵. Par (iv), la matrice de f dans cette base est symétrique.

 $(iii) \Rightarrow (i)$. Notons $\mathcal{B} = (b_1, \dots, b_N)$ une base orthonormée de \mathbb{R}^N dans laquelle la matrice A de f est symétrique. Comme pour la preuve de $(i) \Rightarrow (iv)$, cela signifie que, pour tous $1 \leq i, j \leq N$, on a

$$A_{i,j} = f(b_j) \cdot b_i = A_{j,i} = f(b_i) \cdot b_j.$$

Soit ensuite $x, y \in \mathbb{R}^N$. Par le corollaire 1.25, on a

$$x = \sum_{j=1}^{N} [x \cdot b_j] b_j,$$
 donc $f(x) = \sum_{j=1}^{N} [x \cdot b_j] f(b_j)$

par linéarité de f et, de même,

$$y = \sum_{j=1}^{N} [y \cdot b_j] b_j,$$
 donc $f(y) = \sum_{j=1}^{N} [y \cdot b_j] f(b_j),$

d'où, par le corollaire 1.4,

$$f(x) \cdot y - x \cdot f(y) = \left[\sum_{j=1}^{N} [x \cdot b_j] f(b_j) \right] \cdot \left[\sum_{k=1}^{N} [y \cdot b_k] b_k \right] - \left[\sum_{j=1}^{N} [x \cdot b_j] b_j \right] \cdot \left[\sum_{k=1}^{N} [y \cdot b_k] f(b_k) \right]$$
$$= \sum_{j,k=1}^{N} [x \cdot b_j] \times [y \cdot b_k] \times \left(f(b_j) \cdot b_k - b_j \cdot f(b_k) \right) = 0.$$

^{4.} Certains auteurs disent endomorphisme symétrique pour endomorphisme autoadjoint.

^{5.} On peut aussi appliquer le corollaire 1.32 à une base quelconque de \mathbb{R}^N .

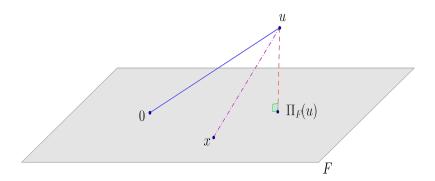


FIGURE 1.5 – Projection orthogonale dans \mathbb{R}^2 : le vecteur $u - \Pi_F(u)$ est orthogonal à F; la longueur du segment violet est plus grande que celle du segment rouge.

Cela montre que f est autoadjoint.

Enfin, on a clairement $(ii) \Rightarrow (iii)$ et $(iv) \Rightarrow (ii)$ puisque la base canonique de \mathbb{R}^N est orthonormée.

Exemple 1.36. L'application $f: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ de l'exemple 1.34 précédent a pour matrice dans la base canonique $\begin{pmatrix} 2 & -3 \\ -3 & 1/2 \end{pmatrix}$ qui est bien symétrique.

1.5 Projection orthogonale dans \mathbb{R}^N

Dans cette section, nous définissons la notion importante de projection orthogonale (voir la figure 1.5).

Théorème 1.37. [Théorème de projection orthogonale sur un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N] Soit F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N et $u \in \mathbb{R}^N$.

- (i) Il existe un unique $x \in F$ tel que $u x \in F^{\perp}$. Ce $x \in F$ est noté $\Pi_F(u)$.
- (ii) Si (b_1,\ldots,b_r) est une base orthonormée de F, alors $\Pi_F(u)=\sum_{k=1}^r (u\cdot b_k)b_k$.
- (iii) Il existe un unique $x \in F$ vérifiant $||u x|| \le ||u x'||$ quel que soit $x' \in F$, et il s'agit de $\Pi_F(u)$.

Preuve. (i) Montrons la partie unicité de cette assertion. Si x et $x' \in F$ conviennent, alors $u - x \in F^{\perp}$ et $u - x' \in F^{\perp}$. Comme F^{\perp} est un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N , on a $(u - x') - (u - x) = x - x' \in F^{\perp}$. Mais F également est un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N , qui contient x et x', donc $x - x' \in F$. Ainsi, $x - x' \in F \cap F^{\perp} = \{0\}$, c'est-à-dire x' = x.

- (ii) Si (b_1, \ldots, b_r) est une base orthonormée de F, alors la proposition 1.24 (ii) assure que $\sum_{k=1}^{r} (u \cdot b_k) b_k \in F$ et $u \sum_{k=1}^{r} (u \cdot b_k) b_k \in F^{\perp}$. Comme il existe, par le corollaire 1.32, au moins une base orthonormée de F, cela prouve à la fois (ii) et l'existence pour (i). Le vecteur $\Pi_F(u)$ est donc bien défini.
- (iii) Montrons que $\Pi_F(u)$ convient. Soit donc $x' \in F$. Alors,

$$\begin{aligned} \|u - \Pi_F(u)\|^2 - \|u - x'\|^2 \\ &= \|u - \Pi_F(u)\|^2 - \|(u - \Pi_F(u)) - (x' - \Pi_F(u))\|^2 \\ &= \|u - \Pi_F(u)\|^2 - (\|u - \Pi_F(u)\|^2 + \|x' - \Pi_F(u)\|^2 - 2(u - \Pi_F(u)) \cdot (x' - \Pi_F(u))) \\ &= -\|x' - \Pi_F(u)\|^2, \end{aligned}$$

puisque $u - \Pi_F(u) \in F^{\perp}$ et $x' - \Pi_F(u) \in F$ (sous-espace vectoriel). On a donc bien $||u - \Pi_F(u)|| \leq ||u - x'||$, et l'inégalité est stricte sauf si $x' = \Pi_F(u)$.

Supposons ensuite que $x \in F$ soit tel que $||u-x|| \le ||u-x'||$ quel que soit $x' \in F$. En particulier, avec $x' = \Pi_F(u) \in F$, on obtient $||u - x|| \leq ||u - \Pi_F(u)||$. De plus, d'après ce que l'on vient de faire, $||u-\Pi_F(u)|| \le ||u-x||$, donc $||u-x|| = ||u-\Pi_F(u)||$, ce qui implique, toujours par ce que l'on vient de faire (avec $x' = x \in F$), $x = \Pi_F(u)$, ce qui conclut.

Corollaire 1.38. Soit F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N . Alors F et F^{\perp} sont supplémentaires et orthogonaux. c'est-à-dire $F \oplus F^{\perp} = \mathbb{R}^N$ et $F \perp F^{\perp}$, ce que l'on note $\mathbb{R}^N = F \oplus F^{\perp}$. En particulier :

- $(i) \dim(F^{\perp}) + \dim(F) = N;$
- (ii) $(F^{\perp})^{\perp} = F$.
- (iii) $F = \mathbb{R}^N$ si et seulement si $F^{\perp} = \{0\}$; de même, $F = \{0\}$ si et seulement si $F^{\perp} = \mathbb{R}^N$.

Preuve. Le (i) du théorème 1.37 nous dit que F et F^{\perp} sont supplémentaires dans \mathbb{R}^N , puisque tout $u \in \mathbb{R}^N$ admet une unique décomposition x + y avec $x \in F$ et $y \in F^{\perp}$.

- (i) Il suffit de passer à la dimension dans $F \oplus F^{\perp} = \mathbb{R}^{N}$ (et d'utiliser la formule de Grassman).
- (ii) Notons tout d'abord l'inclusion $F \subset (F^{\perp})^{\perp}$. En effet, prenons $u \in F$. Pour tout $v \in F^{\perp}$, on a $u \cdot v = 0$, donc $u \in (F^{\perp})^{\perp}$. En appliquant (i) à F^{\perp} et à F, on déduit dim $(F^{\perp})^{\perp} = N \dim(F^{\perp}) = \dim F$. Ainsi, $F \subset (F^{\perp})^{\perp}$ et les deux sous-espaces ont la même dimension (finie), donc $F = (F^{\perp})^{\perp}$.
- (iii) On a déjà vu que si $F = \mathbb{R}^N$, alors $F^{\perp} = \{0\}$ (voir l'exemple 1.13 (iv)). Réciproquement, supposons $F^{\perp} = \{0\}$. Alors, par (i), on trouve $\dim(F) = N$, d'où $F = \mathbb{R}^N$ (F est un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N). On peut aussi utiliser (ii) et l'exemple 1.13 (iii) : $F = (F^{\perp})^{\perp} = \{0\}^{\perp} = \mathbb{R}^{N}$. Enfin, on peut appliquer l'égalité $\mathbb{R}^N = F \oplus F^{\perp} = F \oplus \{0\} = F.$

Corollaire 1.39. Si F et G sont des sous-espaces vectoriels de \mathbb{R}^N , alors $(F \cap G)^{\perp} = F^{\perp} + G^{\perp}$.

Preuve. Par la proposition 1.18 (iii), on sait que $(\tilde{F} + \tilde{G})^{\perp} = \tilde{F}^{\perp} \cap \tilde{G}^{\perp}$ pour tous sous-espaces vectoriels \tilde{F} et \tilde{G} de \mathbb{R}^N . On applique cela à $\tilde{F} = F^{\perp}$ et $\tilde{G} = G^{\perp}$, qui sont bien des sous-espaces vectoriels de \mathbb{R}^N . Alors,

$$(F^{\perp} + G^{\perp})^{\perp} = (\tilde{F} + \tilde{G})^{\perp} = \tilde{F}^{\perp} \cap \tilde{G}^{\perp} = F \cap G$$

par le corollaire 1.38 (ii). On conclut par une nouvelle application du corollaire 1.38 (ii).

Théorème 1.40. [Propriétés de Π_F] Soit F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N . La projection orthogonale Π_F vérifie les propriétés suivantes :

- (i) Π_F est linéaire:
- (ii) $\operatorname{Im}(\Pi_F) = F$, $\Pi_F(u) = u$ pour $u \in F$, et $\operatorname{Ker}(\Pi_F) = F^{\perp}$;
- (iii) $\Pi_F \circ \Pi_F = \Pi_F$;
- $(iv) \ \Pi_{F^{\perp}} = Id_{\mathbb{R}^N} \Pi_F \ ;$
- (v) l'endomorphisme Π_F est autoadjoint;
- (vi) il existe une base orthonormée de \mathbb{R}^N dans laquelle la matrice de Π_F est $\mathrm{Diag}(1,\ldots,1,0,\ldots,0)$, et le nombre de 1 est égal à $\operatorname{rg}(\Pi_F) = \dim F = \operatorname{Tr}(\Pi_F)$.

Preuve. Toutes les propriétés de Π_F découlent du théorème 1.37 (i). (i) Soit $u_1, u_2 \in \mathbb{R}^N$ et $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$. On sait, par le théorème 1.37 (i), que $u_1 - \Pi_F(u_1) \in F^{\perp}$ et $u_2 - \Pi_F(u_2) \in \mathbb{R}^N$ F^{\perp} . Or, F^{\perp} est un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N (cf. proposition 1.12), donc

$$\lambda_1 (u_1 - \Pi_F(u_1)) + \lambda_2 (u_2 - \Pi_F(u_2)) = (\lambda_1 u_1 + \lambda_2 u_2) - (\lambda_1 \Pi_F(u_1) + \lambda_2 \Pi_F(u_2)) \in F^{\perp},$$

avec $\lambda_1\Pi_F(u_1) + \lambda_2\Pi_F(u_2) \in F$ (car F est un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N par hypothèse). De l'unicité dans le théorème 1.37 (i), il vient alors $\Pi_F(\lambda_1 u_1 + \lambda_2 u_2) = \lambda_1 \Pi_F(u_1) + \lambda_2 \Pi_F(u_2)$. Cela montre que Π_F est linéaire.

Un autre argument serait d'utiliser la formule $\Pi_F(u) = \sum_{j=1}^r (u \cdot b_j) b_j$, où (b_1, \dots, b_r) est une base orthonormée de F (il en existe!), et la linéarité à gauche du produit scalaire.

(ii) Il est clair que, par construction, $\operatorname{Im}(\Pi_F) \subset F$. D'autre part, si $u \in F$, alors on a $u - u = 0 \in F^{\perp}$, avec $u \in F$, donc, toujours par unicité dans le théorème 1.37 (i), il vient $\Pi_F(u) = u$.

Si $u \in F^{\perp}$, alors on a $u - 0 = u \in F^{\perp}$ avec $0 \in F$, donc, par unicité dans le théorème 1.37 (i), on obtient $\Pi_F(u) = 0$. On a donc $F^{\perp} \subset \text{Ker }\Pi_F$. De plus, si $u \in \text{Ker }\Pi_F$, alors $u - \Pi_F(u)$ vaut, d'une part, u et est, d'autre part, dans F^{\perp} , d'où $u \in F^{\perp}$. Cela montre que $\text{Ker}(\Pi_F) = F^{\perp}$.

(iii) Pour $u \in \mathbb{R}^N$, on a $\Pi_F(u) \in F$, donc, par (ii), $\Pi_F \circ \Pi_F(u) = \Pi_F(\Pi_F(u)) = \Pi_F(u)$.

(iv) Soit $u \in \mathbb{R}^N$. On a $u - (\mathrm{Id}_{\mathbb{R}^N} - \Pi_F)(u) = \Pi_F(u) \in F = (F^{\perp})^{\perp}$, donc, par la définition du projeté orthogonal, $\Pi_{F^{\perp}}(u) = (\mathrm{Id}_{\mathbb{R}^N} - \Pi_F)(u)$.

(v) Soit $u, v \in \mathbb{R}^N$. On a $u = (u - \Pi_F(u)) + \Pi_F(u) \in F^{\perp} + F$, donc

$$u \cdot \Pi_F(v) = \left(\left(u - \Pi_F(u) \right) + \Pi_F(u) \right) \cdot \Pi_F(v) = \left(u - \Pi_F(u) \right) \cdot \Pi_F(v) + \Pi_F(u) \cdot \Pi_F(v) = \Pi_F(u) \cdot \Pi_F(v),$$

puisque $u - \Pi_F(u) \in F^{\perp}$ est orthogonal à $\Pi_F(v) \in F$. Par un calcul analogue, on trouve $\Pi_F(u) \cdot v = \Pi_F(u) \cdot \Pi_F(v)$, ce qui prouve que Π_F est autoadjoint.

(vi) On choisit (b_1, \ldots, b_r) une base orthonormée de $F = \operatorname{Im}(\Pi_F)$ (cela existe par le corollaire 1.32), de sorte que $r = \dim \left(\operatorname{Im}(\Pi_F)\right) = \operatorname{rg}(\Pi_F)$. Puis, on choisit (b_{r+1}, \ldots, b_N) une base orthonormée de $\operatorname{Ker}(\Pi_F) = F^{\perp}$ (par (ii)). On vérifie alors sans peine que (b_1, \ldots, b_N) est une base orthonormée de \mathbb{R}^N . Dans cette base, la matrice de Π_F a la forme annoncée, puisque $\Pi_F(b_j) = b_j$ si $1 \leq j \leq r$ et $\Pi_F(b_j) = 0$ si $r+1 \leq j \leq N$. La trace de Π_F étant la trace de la matrice de Π_F dans n'importe quelle base, donc en particulier dans celle que l'on vient de définir, on a $\operatorname{Tr}(\Pi_F) = \operatorname{Tr}\left(\operatorname{Diag}(1,\ldots,1,0,\ldots,0)\right) = r$.

Définition 1.41. [Distance à un sous-espace vectoriel] Soit F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N . On appelle distance de u à F le nombre

$$dist(u, F) = \inf_{x \in F} \|u - x\| = \min_{x \in F} \|u - x\| = \|u - \Pi_F(u)\| = \|\Pi_{F^{\perp}}(u)\|.$$

La proposition suivante est alors une conséquence directe du théorème 1.40.

Proposition 1.42. Soit F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N . Alors, pour tout $u \in \mathbb{R}^N$, on a

$$||u||^2 = ||u - \Pi_F(u)||^2 + ||\Pi_F(u)||^2 = ||\Pi_{F^{\perp}}(u)||^2 + ||\Pi_F(u)||^2 = dist^2(u, F) + dist^2(u, F^{\perp}).$$

On cherche ensuite comment déterminer la projection orthogonale sur un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N défini comme un noyau ou comme une image. Si l'on veut projeter sur une image et que l'on dispose d'une base orthonormée de celle-ci, alors la formule (ii) du théorème 1.37 fournit un moyen de calculer le projeté. Si l'on ne dispose pas d'une telle base orthonormée mais juste d'une base (w_1, \ldots, w_r) , on peut choisir d'orthonormaliser cette base avec la méthode de Gram-Schmidt, ou appliquer le théorème suivant.

Théorème 1.43. [Projection sur une image] Soit F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N . On suppose avoir une famille génératrice (w_1, \ldots, w_r) de F. On note $\Gamma = \Gamma(w_1, \ldots, w_r) = ((w_i \cdot w_j))_{1 \leq i,j \leq r}$ la matrice de Gram de la famille (w_1, \ldots, w_r) . Alors, on a

$$\Pi_F(u) = \sum_{k=1}^r \alpha_k w_k$$

 $pour(\alpha_1, \ldots, \alpha_r) \in \mathbb{R}^r$ solution du système

$$\Gamma \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \cdot w_1 \\ \vdots \\ u \cdot w_r \end{pmatrix}.$$

Remarque 1.44. On notera que l'on ne demande pas à la famille (w_1, \ldots, w_r) d'être libre. Dans ce cas, l'écriture $\Pi_F(u) = \sum_{k=1}^r \alpha_k w_k$ n'est pas nécessairement unique. Le théorème 1.43 montre au passage l'existence de solutions. Enfin, si par hasard la famille (w_1, \ldots, w_r) est orthonormée (resp. orthogonale), alors Γ vaut l'identité (resp. est diagonale). En pratique, s'il n'y a qu'un (ou relativement peu) de projetés à calculer, on peut appliquer le théorème 1.43 et résoudre autant de systèmes linéaires que de projections à calculer. S'il y a beaucoup de projetés à calculer, il peut être intéressant d'orthonormaliser la famille afin de calculer la projection par la formule (ii) du théorème 1.37.

Preuve. Puisque, par hypothèse, la famille (w_1, \ldots, w_r) est génératrice de F, il existe $\alpha_1, \ldots, \alpha_r \in \mathbb{R}$ tels que $\Pi_F(u) = \sum_{k=1}^r \alpha_k w_k$. On fixe $1 \leq j \leq r$ et on prend le produit scalaire de cette égalité avec w_j :

$$w_j \cdot \Pi_F(u) = w_j \cdot \left(\sum_{k=1}^r \alpha_k w_k\right) = \sum_{k=1}^r \alpha_k w_j \cdot w_k.$$

Par ailleurs, comme $u - \Pi_F(u) \in F^{\perp}$, $u - \Pi_F(u)$ est orthogonal à $w_j \in F$, ce qui entraı̂ne $w_j \cdot (u - \Pi_F(u)) = 0$, soit, par linéarité du produit scalaire,

$$w_j \cdot \Pi_F(u) = w_j \cdot u.$$

Par conséquent,

$$w_j \cdot u = w_j \cdot \Pi_F(u) = \sum_{k=1}^r \alpha_k w_j \cdot w_k,$$

ce qui est exactement la j-ième ligne du système linéaire

$$\Gamma \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \cdot w_1 \\ \vdots \\ u \cdot w_r \end{pmatrix}.$$

Cela conclut la démonstration.

Supposons maintenant que l'on souhaite faire une projection orthogonale sur un noyau. On se donne donc $r \in \mathbb{N}^*$ et $w_1, \dots, w_r \in \mathbb{R}^N$ (pas nécessairement libre) et on considère

$$F = \{u \in \mathbb{R}^N \text{ t.q. } w_1 \cdot u = \dots = w_r \cdot u = 0\} = \bigcap_{j=1}^r (\{w_j\}^\perp).$$

Dans cette situation, il est intéressant de projeter d'abord sur F^{\perp} , puis d'utiliser la relation $\Pi_{F^{\perp}} + \Pi_{F} = \operatorname{Id}_{\mathbb{R}^{N}}$ du théorème 1.40. En effet, par le corollaire 1.39, on a

$$F^{\perp} = \sum_{j=1}^{r} \operatorname{Vect} w_j = \operatorname{Vect} (w_1, \dots, w_r),$$

et l'on se retrouve donc dans la situation où l'on projette sur une image, et l'on peut donc appliquer le théorème 1.43. Un cas particulier important de projection sur un noyau est le cas de projection sur un hyperplan.

Proposition-Définition 1.45. [Hyperplan] Soit F un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N . Les assertions suivantes sont équivalentes :

- (i) $\dim(F) = N 1$;
- (ii) il existe $h: \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ linéaire et non nulle telle que F = Ker(h).
- (iii) il existe $w \in \mathbb{R}^N$ non nul tel que $F = \{u \in \mathbb{R}^N | t.q. \ w \cdot u = 0\}$.

Dans ce cas, F est appelé un hyperplan de \mathbb{R}^N . Tout vecteur w comme en (iii) est appelé un vecteur normal à l'hyperplan F. Tous les vecteurs normaux à F sont multiples (non nuls) les uns des autres.

Preuve. (iii) \Rightarrow (ii). Il suffit de prendre $h: u \mapsto w \cdot u$, qui est bien linéaire et non nulle (car $h(w) = ||w||^2 \neq 0$). (ii) \Rightarrow (i). Le théorème du rang nous donne $N = \dim \big(\operatorname{Ker}(h) \big) + \operatorname{rg}(h)$. Or, $\operatorname{Im}(h)$ est un sous-espace vectoriel de $\mathbb R$ qui n'est pas réduit à $\{0\}$, donc c'est $\mathbb R$. On en déduit que $\operatorname{rg}(h) = 1$, puis que $\dim \big(\operatorname{Ker}(h) \big) = N - 1$, et enfin que $\dim(F) = N - 1$.

 $(i) \Rightarrow (iii)$. Par le corollaire 1.38 (i), F^{\perp} est de dimension 1 : on considère alors $w \in F^{\perp} \setminus \{0\}$. Ainsi, $F^{\perp} = \text{Vect } w$, d'où, par le corollaire 1.38 (ii) et la proposition 1.18, $F = (\text{Vect } w)^{\perp} = \{w\}^{\perp}$, comme souhaité.

Les vecteurs normaux à l'hyperplan F sont donc exactement les éléments de $F^{\perp} \setminus \{0\}$.

La projection sur l'orthogonal d'un hyperplan étant particulièrement simple à calculer (c'est la projection sur une droite), on a le résultat suivant.

Théorème 1.46. Soit $w \in \mathbb{R}^N$ non nul et F l'hyperplan $\{u \in \mathbb{R}^N \ t.q. \ w \cdot u = 0\} = \{w\}^{\perp}$. Alors, pour tout $u \in \mathbb{R}^N$, on a

$$\Pi_F(u) = u - \frac{w \cdot u}{\|w\|^2} w$$

et

$$\operatorname{dist}(u, F) = \frac{|w \cdot u|}{\|w\|}.$$

Preuve. Comme on l'a indiqué, il suffit de projeter d'abord sur $\text{Vect}(w) = F^{\perp}: \Pi_{F^{\perp}}(u) = \frac{w \cdot u}{\|w\|^2} w$ d'après le théorème 1.37 (ii) avec $b_1 = w/\|w\|$. Ensuite, $\Pi_F(u) = u - \Pi_{F^{\perp}}(u)$.

Exemple 1.47. Dans \mathbb{R}^3 , $F = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \text{ t.q. } 3x - 2y - 4z = 0\} = \{(3, -2, -4)\}^{\perp}$ est un hyperplan (c'est un plan dans \mathbb{R}^3), et w = (3, -2, -4) est un vecteur normal à F. La projection orthogonale sur F s'écrit donc $\Pi_F(u) = u - \frac{u \cdot w}{20} w$. En particulier,

$$\operatorname{dist}((1,1,1),F) = \frac{|(3,-2,-4)\cdot(1,1,1)|}{\|(3,-2,-4)\|} = \frac{3}{\sqrt{29}}.$$

On a donné dans le théorème 1.40 des propriétés de Π_F , dont en particulier le fait (iii) que $\Pi_F \circ \Pi_F = \Pi_F$, le fait (ii) que l'image F de Π_F et son noyau sont supplémentaires orthogonaux, et le fait (v) que Π_F soit autoadjoint. Inversement, ces propriétés caractérisent les projections orthogonales.

Théorème 1.48. [Caractérisation des projections orthogonales] Soit $f \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$ tel que $f \circ f = f$. Les assertions suivantes sont équivalentes :

- (i) $\operatorname{Ker}(f) \perp \operatorname{Im}(f)$;
- (ii) $\operatorname{Ker}(f) = [\operatorname{Im}(f)]^{\perp}$;
- (iii) f est autodjoint.

Dans ce cas, $f = \Pi_{\operatorname{Im}(f)}$ et $\operatorname{Tr}(f) = \operatorname{rg}(f) = \dim (\operatorname{Im}(f))$.

Preuve. (i) \Rightarrow (iii). Soit $u, v \in \mathbb{R}^N$. On a u = (u - f(u)) + f(u), avec $f(u) \in \text{Im}(f)$ et $u - f(u) \in \text{Ker}(f)$ puisque $f(u - f(u)) = f(u) - f \circ f(u) = 0$ car $f \circ f = f$. Comme $\text{Ker}(f) \perp \text{Im}(f)$, on en déduit

$$u \cdot f(v) = (u - f(u)) \cdot f(v) + f(u) \cdot f(v) = 0 + f(u) \cdot f(v) = f(u) \cdot f(v).$$

Un calcul analogue montre que $f(u) \cdot v = f(u) \cdot f(v)$, et on en déduit $u \cdot f(v) = f(u) \cdot v = f(u) \cdot f(v)$. Ainsi, f est bien autoadjoint.

 $(iii) \Rightarrow (i)$. Soit $u \in \text{Ker}(f)$ et $v \in \text{Im}(f)$. Il existe donc $y \in \mathbb{R}^N$ tel que v = f(y). On a alors, puisque f est autoadjoint,

$$u \cdot v = u \cdot f(y) = f(u) \cdot y = 0 \cdot y = 0$$
,

ce qui montre que $u \perp v$.

- $(ii) \Rightarrow (i)$. C'est évident.
- $(i) \Rightarrow (ii)$. (i) donne l'inclusion $\operatorname{Ker}(f) \subset [\operatorname{Im}(f)]^{\perp}$. Un premier argument est de montrer l'inclusion manquante $[\operatorname{Im}(f)]^{\perp} \subset \operatorname{Ker}(f)$. Soit donc $u \in [\operatorname{Im}(f)]^{\perp}$. Cela veut dire que, pour tout $y \in \mathbb{R}^N$, on a $u \cdot f(y) = 0$. Or, par (iii), f est autoadjoint, donc $f(u) \cdot y = 0$. Cela étant vrai pour tout $y \in \mathbb{R}^N$, on obtient f(u) = 0, soit $u \in \operatorname{Ker}(f)$, comme souhaité.

Un second argument est comparer les dimensions. On a, par le théorème du rang, dim $(\text{Ker}(f)) = N - \dim(\text{Im}(f)) = \dim([\text{Im}(f)]^{\perp})$ par le corollaire 1.38. On a donc une inclusion et égalité des dimensions (finies), donc il y a égalité des sous-espaces vectoriels.

Comme f et $\Pi_{\operatorname{Im} f}$ sont linéaires et vu que $\mathbb{R}^N = \operatorname{Ker}(f) + \operatorname{Im}(f)$, si l'on veut montrer que $f = \Pi_{\operatorname{Im} f}$, il suffit de vérifier que $f(u) = \Pi_{\operatorname{Im} f}(u)$ si $u \in \operatorname{Ker} f$ et si $u \in \operatorname{Im} f$. Si $u \in \operatorname{Ker} f$, alors f(u) = 0, et comme $\operatorname{Ker}(f) = \operatorname{Im}(f)^{\perp}$, on a $\Pi_{\operatorname{Im} f}(u) = 0$. Ainsi $f(u) = \Pi_{\operatorname{Im} f}(u) = 0$ si $u \in \operatorname{Ker} f$. De plus, si $u \in \operatorname{Im} f$, c'est qu'il existe $y \in \mathbb{R}^N$ tel que u = f(y). Alors, d'une part, $f(u) = f \circ f(y) = f(y) = u$, et d'autre part, $\Pi_{\operatorname{Im} f}(u) = u$, donc là encore $f(u) = \Pi_{\operatorname{Im} f}(u) = u$. On a bien montré que $f = \Pi_{\operatorname{Im} f}$.

Si l'on souhaite travailler en colonne, on peut bien sûr énoncer un théorème analogue au théorème 1.37 (avec un sous-espace vectoriel de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$). La preuve est strictement la même.

Théorème 1.49. [Théorème de projection orthogonale sur un sous-espace vectoriel de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$] Soit F un sous-espace vectoriel de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$.

- (i) Il existe un unique $x \in F$ tel que $u x \in F^{\perp}$. Ce $x \in F$ est noté $\Pi_F(u)$.
- (ii) Si (b_1, \ldots, b_r) est une base orthonormée de F, alors $\Pi_F(u) = \sum_{k=1}^r (u \cdot b_k) b_k$.
- (iii) Il existe un unique $x \in F$ vérifiant $||u x|| \le ||u x'||$ quel que soit $x' \in F$, et il s'agit de $\Pi_F(u)$.

On rappelle également que l'on note, pour $A \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R})$,

$$\operatorname{Ker}(A) = \{ X \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R}) | AX = 0 \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) \} \quad \text{et} \quad \operatorname{Im}(A) = \{ AX \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) | X \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R}) \}.$$

On peut donner alors un analogue du théorème 1.48 valable pour les matrices.

Théorème 1.50. [Caractérisation des matrices de projection orthogonales] Soit $P \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ une matrice vérifiant $P^2 = P$. Les assertions suivantes sont équivalentes :

- (i) $\operatorname{Ker}(P) \perp \operatorname{Im}(P)$;
- $(ii) \operatorname{Ker}(P) = [\operatorname{Im}(P)]^{\perp};$
- (iii) P est symétrique.

Dans ce cas, P est la matrice de $\Pi_{\operatorname{Im}(P)}$ et $\operatorname{Tr}(P) = \operatorname{rg}(P) = \dim (\operatorname{Im}(P))$.

Exemple 1.51. On considère la matrice

$$P = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}.$$

On calcule facilement $P^2 = P$, et il est clair que P est symétrique, donc, par le théorème 1.50, on sait que P est la matrice d'une projection orthogonale Π_F dans la base canonique de \mathbb{R}^2 . En outre, on sait que c'est la projection orthogonale sur $F = \text{Im}(\Pi_F) = \text{Vect}((1, -2), (-2, 4))$ qui est de dimension $\text{rg}(\Pi_F) = \text{Tr}(\Pi_F) = \text{Tr}(\Pi_F)$ Tr(P) = 1. On en déduit que F = Vect((1, -2)). Ainsi, P est la matrice de la projection orthogonale sur la droite $F = \text{Vect}((1, -2)) = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \text{ t.q. } y = -2x\}.$

Théorème de l'alternative 1.6

Dans cette section, nous travaillerons plutôt avec des vecteurs colonne. On se rappelle que si $A \in \mathcal{M}_{n,p}(\mathbb{R})$ et $B \in \mathcal{M}_{p,q}(\mathbb{R})$, alors

$$(AB)^T = B^T A^T \in \mathcal{M}_{q,n}(\mathbb{R}).$$

Cela permet d'établir les deux relations fondamentales suivantes. Pour $A \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R}), X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ et $Y \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$, on a

$$X \cdot (AY) = X^{T}(AY) = (X^{T}A)Y = (A^{T}X)^{T}Y = (A^{T}X) \cdot Y.$$

Par ailleurs,

$$Y \cdot (A^T A Y) = Y^T (A^T A Y) = (Y^T A^T)(AY) = (AY)^T (AY) = (AY) \cdot (AY) = ||AY||^2.$$

Théorème 1.52. [Théorème de l'alternative] Soit $p, N \in \mathbb{N}^*$ et $A \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R})$. Alors, on a:

- (i) $\operatorname{Ker}(A^T) = \operatorname{Im}(A)^{\perp} \subset \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ et $\operatorname{Im}(A^T) = \operatorname{Ker}(A)^{\perp} \subset \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$; (ii) $\operatorname{Ker}(A^T A) = \operatorname{Ker}(A) \subset \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$ et $\operatorname{Im}(A^T A) = \operatorname{Im}(A^T) = \operatorname{Ker}(A)^{\perp} \subset \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$.

Preuve. (i) Pour $u \in \mathcal{M}_{N,1}$, on a

$$u \in \operatorname{Im}(A)^{\perp} \Leftrightarrow \forall y \in \mathcal{M}_{n,1}, \ u \cdot (Ay) = 0 \Leftrightarrow \forall y \in \mathcal{M}_{n,1}, \ (A^T u) \cdot y = 0 \Leftrightarrow A^T u = 0 \Leftrightarrow u \in \operatorname{Ker}(A^T),$$

où, pour la troisième équivalence, on a utilisé que $(\mathcal{M}_{p,1})^{\perp} = \{0\}$. Pour la seconde assertion, on applique le cas précédent à A^T , ce qui donne $\operatorname{Ker}(A) = \operatorname{Im}(A^T)^{\perp}$, on on conclut grâce au corollaire 1.38.

(ii) Montrons que $\operatorname{Ker}(A^TA) = \operatorname{Ker}(A)$ par double inclusion. Il est clair que $\operatorname{Ker}(A) \subset \operatorname{Ker}(A^TA)$: si $Y \in \operatorname{Ker}(A)$, alors $(A^TA)Y = A^T(AY) = A^T0 = 0$. Maintenant, si $Y \in \operatorname{Ker}(A^TA)$, alors $Y^TA^TAY = Y^T0 = 0$, donc, par la deuxième relation mentionnée, $||AY||^2 = 0$, c'est-à-dire AY = 0, et donc $Y \in \operatorname{Ker}(A)$, comme voulu.

Pour l'autre égalité, on applique (i) à A^TA , qui est symétrique, ce qui donne $\text{Im}(A^TA) = \text{Im}((A^TA)^T) = [\text{Ker}(A^TA)]^{\perp} = \text{Ker}(A)^{\perp} = \text{Im}(A^T)$ par ce que l'on vient de montrer et (i).

Nous allons donner maintenant un exemple d'application du théorème 1.52 de l'alternative. On fixe $N \in \mathbb{N}^*$ et on envisage la relation de récurrence

$$(\star) u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} + f_n = 0, 1 \le n \le N,$$

où $(f_n)_{1 \leq n \leq N}$ est donné et où $(u_n)_{0 \leq n \leq N+1}$ est l'inconnue.

Si l'on fixe $(a_0, a_1) \in \mathbb{R}^2$, on sait par le cours sur les équations de récurrence qu'il existe une unique solution $(u_n)_{0 \le n \le N+1}$ à (\star) vérifiant $(u_0, u_1) = (a_0, a_1)$. On calcule alors de proche en proche $u_2 = (2u_1 - u_0 - f_1)$, puis $u_3 = (2u_2 - u_1 - f_2)$, etc.

Envisageons maintenant des conditions différentes. On fixe $(a_0, a_{N+1}) \in \mathbb{R}^2$, et on souhaite résoudre (\star) avec les conditions $(u_0, u_{N+1}) = (a_0, a_{N+1})$. Là, ce n'est plus une équation de récurrence où l'on calcule les termes de proche en proche. En fait, le problème (\star) avec les conditions $(u_0, u_{N+1}) = (a_0, a_{N+1})$ peut s'écrire sous forme matricielle

$$MU = F,$$
 $U = (u_0, \dots, u_{N+1})^T,$ $F = (a_0, f_1, \dots, f_N, a_{N+1})^T,$ $M = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 & 2 & -1 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & 1 \end{pmatrix}.$

Montrons que $M \in \mathcal{M}_{N+2}(\mathbb{R})$ est inversible. Prenons $X \in \text{Ker}(M)$. Alors MX = 0, ce qui se traduit par $X_0 = X_{N+1} = 0$ et, pour $1 \leqslant n \leqslant N$, $X_{n+1} + X_{n-1} - 2X_n = 0$. On résout cette relation de récurrence. L'équation caractéristique est $r^2 - 2r + 1 = (r-1)^2 = 0$, dont 1 est racine double, donc la solution générale est $X_n = \lambda + \mu n$, $0 \leqslant n \leqslant N+1$, avec λ , μ constantes. Comme $X_0 = X_{N+1} = 0$, cela impose $\lambda = 0 = \lambda + \mu(N+1)$, soit $\lambda = \mu = 0$, puis $X_n = 0$ pour $0 \leqslant n \leqslant N+1$. Donc $\text{Ker}(M) = \{0\}$ et M est inversible. Quelle que soit la donnée $(f_n)_{1 \leqslant n \leqslant N}$, il y a donc une unique solution $(u_n)_{0 \leqslant n \leqslant N+1}$ de (\star) vérifiant $(u_0, u_{N+1}) = (a_0, a_{N+1})$.

Si l'on considère désormais les conditions $(u_0, u_{N+1}) = (u_1, u_N)$, alors le problème se reformule matriciellement en

$$\tilde{M}U = \tilde{F}, \qquad U = (u_0, \dots, u_{N+1})^T, \qquad \tilde{F} = (0, f_1, \dots, f_N, 0)^T, \qquad \tilde{M} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Cette fois-ci, la matrice $\tilde{M} \in \mathcal{M}_{N+2}(\mathbb{R})$ n'est plus inversible. En effet, on a

$$X \in \text{Ker}(\tilde{M}) \Leftrightarrow \begin{cases} X_0 = X_1 \\ X_2 = 2X_1 - X_0 = X_0 \\ X_3 = 2X_2 - X_1 = X_0 \\ \dots = \dots \\ X_{N+1} = 2X_N - X_{N-1} = X_0, \end{cases}$$

autrement dit $\operatorname{Ker}(\tilde{M}) = \operatorname{Vect}(w)$, avec $w = (1, \dots, 1)^T \in \mathcal{M}_{N+2,1}(\mathbb{R})$. Si l'on veut savoir pour quelles données $(f_n)_{1 \leq n \leq N}$ il y a une solution (non unique) $(u_n)_{0 \leq n \leq N+1}$ de (\star) vérifiant $(u_0, u_{N+1}) = (a_0, a_{N+1})$,

on peut appliquer le théorème 1.52 de l'alternative, qui garantit que $\tilde{M}U = \tilde{F}$ admet (au moins) une solution si et seulement si $\tilde{F} \in \operatorname{Im}(\tilde{M}) = \operatorname{Ker}(\tilde{M}^T)^{\perp} = \operatorname{Ker}(\tilde{M})^{\perp}$, car \tilde{M} est symétrique, donc si et seulement si $\tilde{F} \in \operatorname{Vect}(w)^{\perp}$, donc si et seulement si $\tilde{F} \cdot w = \sum_{n=1}^N f_n = 0$. On se retrouve donc dans l'alternative suivante : soit $\tilde{F} \cdot w = \sum_{n=1}^N f_n = 0$ et alors le système $\tilde{M}U = \tilde{F}$ admet (au moins) une solution, soit $\tilde{F} \cdot w = \sum_{n=1}^N f_n \neq 0$ et alors le système $\tilde{M}U = \tilde{F}$ n'admet pas de solution (on dit qu'il est incompatible). On obtient ainsi la ou les conditions (s'il y en a) à imposer à la donnée $(f_n)_{1 \leqslant n \leqslant N}$ pour que le système soit compatible. S'il l'est, il n'y a pas unicité de la solution puisque $\operatorname{Ker}(\tilde{M}) = \operatorname{Vect} w$. L'ensemble des solutions est alors de la forme $U_{\operatorname{part}} + \lambda w$, avec $\lambda \in \mathbb{R}$ constant et U_{part} une solution particulière du système.

Chapitre 2

Méthode des moindres carrés

Considérons un système linéaire Ax = b, avec $b \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, $x \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$ et $A \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R})$. Si p = N, il y a autant d'équations que d'inconnues. Si p < N, il y a strictement plus d'équations que d'inconnues : on parle de système surdéterminé. Les $b \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ pour lesquels le système Ax = b possède (au moins) une solution sont exactement ceux de $\mathrm{Im}(A)$, qui est un sous-espace vectoriel de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ de dimension $\mathrm{rg}(A) \leq p < N$. Pour un b donné, il est donc peu probable qu'il soit dans $\mathrm{Im}(A)$, et donc, en général, le système Ax = b n'a pas de solution. Si p > N, il y a strictement moins d'équations que d'inconnues : on parle de système sousdéterminé. La situation est inverse : si A est surjective, alors $\mathrm{Im}(A) = \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ et le système Ax = b admet au moins une solution $x_0 \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$, et la solution générale s'écrit $x_0 + z$, avec $z \in \mathrm{Ker}(A)$ (solution particulière plus solution générale de l'équation homogène associée).

2.1 Système linéaire surdéterminé

On envisage ici un système Ax = b surdéterminé, donc avec $p \leq N$. Puisqu'a priori, si p < N, ce système n'a pas de solution, on peut essayer d'en trouver une moins mauvaise que les autres en essayant de rendre la norme de l'erreur Ax - b la plus petite possible. On envisage donc le problème de minimisation

$$\rho(A,b) = \inf_{x \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})} ||Ax - b||.$$

Comme $\operatorname{Im}(A) = \{Ax, x \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})\}$ (les vecteurs sont en colonne), l'infimum $\rho(A, b)$ n'est rien d'autre que la distance de b au sous-espace vectoriel $\operatorname{Im}(A)$. Les résultats de la section 1.5 s'appliquent donc et assurent l'existence et l'unicité de $y_* \in \operatorname{Im}(A)$ tel que $\rho(A, b) = \inf_{x \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})} \|Ax - b\| = \|y_* - b\|$, et $y_* = \Pi_{\operatorname{Im}(A)}(b)$. Comme $y_* \in \operatorname{Im}(A)$, il existe au moins un $x_* \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$ tel que $y_* = Ax_*$, et l'ensemble des $x \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$ tels que $Ax = y_*$ est simplement $x_* + \operatorname{Ker}(A) = \{x_* + z, z \in \operatorname{Ker}(A)\}$.

Pour déterminer x_* , on cherche une équation satisfaite par x_* . Notons que $y_* = \Pi_{\mathrm{Im}(A)}(b)$, donc $y_* - b \in [\mathrm{Im}(A)]^{\perp} = \mathrm{Ker}(A^T)$, c'est-à-dire $A^T(y_* - b) = 0 = A^TAx_* - A^Tb$. On voit donc que les $x \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$ tels que $\rho(A,b) = \|Ax - b\| = \|y_* - b\|$ sont exactement les solutions du système d'équations normales $A^TAx = A^Tb$. Les arguments que l'on vient de donner montrent que le système d'équations normales a toujours (au moins) une solution. On peut aussi voir cela en utilisant le théorème 1.52 de l'alternative : $A^Tb \in \mathrm{Im}(A^T) = \mathrm{Im}(A^TA)$. On rappelle que le système initial Ax = b n'a pas, en général, de solution. Clairement, si le système Ax = b a une solution x_0 , alors $\rho(A,b) = 0$ et x_0 est aussi solution du système d'équations normales : $A^TAx_0 = A^Tb$.

Théorème 2.1. [Pseudo-solution au sens des moindres carrés pour un système surdéterminé] Soit $1 \leq p \leq N$, $A \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R})$ et $b \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$. L'ensemble des $x_* \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$ tels que

$$\rho(A, b) = \inf_{x \in \mathcal{M}_{p, 1}(\mathbb{R})} ||Ax - b|| = ||Ax_* - b||$$

est exactement l'ensemble non vide des solutions x_* du système d'équations normales

$$A^T A x_* = A^T b.$$

On appelle un tel x_* une pseudo-solution de Ax = b au sens des moindres carrés.

Remarque 2.2. Si le système de départ Ax = b est compatible, c'est-à-dire si $\rho(A, b) = 0$, alors on doit avoir $Ax_* = b$, autrement dit x_* est une solution du système s'il est compatible.

Exemple 2.3. On considère la matrice $A \in \mathcal{M}_{3,2}(\mathbb{R})$ et le vecteur colonne $b \in \mathcal{M}_{3,1}(\mathbb{R})$ donnés par

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ -1 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Ici, on a p=2, N=3 et $\operatorname{rg}(A)=2$ (A est injective). On cherche la pseudo-solution au sens des moindres carrés de Ax=b. On forme

$$A^T A = \begin{pmatrix} 6 & 8 \\ 8 & 19 \end{pmatrix}$$
 et $A^T b = \begin{pmatrix} 3 \\ 7 \end{pmatrix}$

et on résout le système $A^TAx = A^Tb$, ce qui donne la pseudo-solution au sens des moindres carrés :

$$x_* = \begin{pmatrix} 1/50 \\ 9/25 \end{pmatrix}.$$

On peut voir que le système Ax = b est incompatible soit en montrant que $b \notin \text{Im}(A)$, soit en calculant

$$Ax_* - b = \frac{1}{50} \begin{pmatrix} 7\\1\\8 \end{pmatrix} \neq 0.$$

Ici, $\rho(A, b) = \frac{\sqrt{114}}{50} \approx 0,213(5).$

2.2 Système linéaire sousdéterminé

On envisage ici un système sousdéterminé Ax = b avec $p \ge N$: il y a donc (strictement si p > N) moins d'équations que d'inconnues. On suppose A surjective, de sorte que le système Ax = b admet au moins une solution $x_0 \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$, et que l'ensemble des solutions est $x_0 + \operatorname{Ker}(A)$ (solution particulière plus solution générale de l'équation homogène associée). Parmi toutes ces solutions, on peut considérer celle de norme minimale (si elle existe). On envisage donc le problème de minimisation

$$\mu(A, b) = \inf\{\|x\| | x \in \mathcal{M}_{n,1}(\mathbb{R}) \text{ t.q. } Ax = b\}.$$

Théorème 2.4. [Solution au sens des moindres carrés pour un système sousdéterminé] Soit $1 \leq N \leq p$, $A \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R})$ surjective et $b \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$. Il existe un unique $x_* \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$ vérifiant $Ax_* = b$ et tel que

$$\mu(A,b) = \inf\{||x|| | |x \in \mathcal{M}_{p,1} \ t.q. \ Ax = b\} = ||x_*||$$

et il est donné par $x_* = A^T z$ avec $z \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ tel que $AA^T z = b$. Il peut y avoir plusieurs $z \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ solutions, mais ils donnent tous le même x_* . Si, de plus, A est de rang N (c'est-à-dire A est surjective), alors le système $AA^T z = b$ admet une unique solution.

Preuve. Le système Ax = b étant suppposé compatible, il existe $x_0 \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R})$ tel que $Ax_0 = b$. Par conséquent, $Ax = b \Leftrightarrow Ax = Ax_0 \Leftrightarrow A(x - x_0) = 0$, ce qui nous ramène à un problème homogène. On a alors, en posant $X = x_0 - x$,

$$\mu(A,b) = \inf\{\|x_0 - X\| | X \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R}) \text{ t.q. } AX = 0\},\$$

ce qui fait apparaître une projection orthogonale sur $\operatorname{Ker}(A)$: il existe un et un seul $X_* \in \operatorname{Ker}(A)$ tel que $\mu(A,b) = \|x_0 - X_*\|$, et il s'agit de $X_* = \Pi_{\operatorname{Ker}(A)}(x_0)$. Cela nous donne donc l'existence et l'unicité de $x_* = x_0 - X_*$. En outre, $x_0 - X_* \in \operatorname{Ker}(A)^{\perp} = \operatorname{Im}(A^T)$ par le théorème 1.52 de l'alternative. Il existe donc $z \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ tel que $x_0 - X_* = A^Tz$. On en déduit que $b = Ax_0 = Ax_0 - AX_* = A(x_0 - X_*) = AA^Tz$. Réciproquement, si $x' = A^Tz$ pour z tel que $b = AA^Tz$, alors $x' \in \operatorname{Im}(A^T) = \operatorname{Ker}(A)^{\perp}$, donc $X = x_0 - x'$ vérifie $AX = Ax_0 - Ax' = b - AA^Tz = 0$ et est le projeté orthogonal de x_0 sur $\operatorname{Ker}(A)$, et donc

$$\mu(A,b) = \inf\{\|x_0 - X\| | X \in \mathcal{M}_{p,1}(\mathbb{R}) \text{ t.q. } AX = 0\} = \|x_0 - X\| = \|x'\|.$$

Cela conclut la démonstration.

Exemple 2.5. On considère la matrice $A \in \mathcal{M}_{2,3}(\mathbb{R})$ et le vecteur colonne $b \in \mathcal{M}_{2,1}(\mathbb{R})$ donnés par

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Ici, on a p=3, N=2 et $\operatorname{rg}(A)=2$ (A est surjective). On cherche la solution au sens des moindres carrés du système sous-déterminé Ax=b. On forme donc

$$AA^T = \begin{pmatrix} 6 & 1 \\ 1 & 6 \end{pmatrix}$$

et on résout le système $AA^Tz = b$, ce qui donne

$$z = \begin{pmatrix} 4/35\\11/35 \end{pmatrix}$$

(ici, z est unique car A est surjective), et la solution au sens des moindres carrés :

$$x_* = A^T z = \begin{pmatrix} 29/35\\ 19/35\\ -15/35 \end{pmatrix}.$$

Ici, $\mu(A, b) = ||x_*|| = \frac{\sqrt{1427}}{35} \approx 1,0793(0).$

2.3 Droite des moindres carrés

On envisage la situation suivante. On est dans le plan \mathbb{R}^2 et on dispose de $N \geq 2$ points (x_i, y_i) , $1 \leq i \leq N$ comme dans la figure 2.1 (avec N=32). Nous pourrions envisager une approximation de ce nuage par une droite. Sur la figure, à droite, on voit que la droite verte (pointillé) est une mauvaise approximation du nuage et la droite rouge (trait continu) est nettement meilleure. Si l'on part d'une équation de droite $y=\alpha_0+\alpha_1x$, avec $\alpha_0, \alpha_1 \in \mathbb{R}$, et d'un point (x_i, y_i) du nuage, on peut dire que $|y_i - [\alpha_0 + \alpha_1 x_i]|$ mesure l'erreur commise lorsque l'on approche le point par la droite (si l'erreur est nulle, c'est que le point est sur la droite). En conséquence, on pourrait définir une erreur globale en sommant sur tous les indices $1 \leq i \leq N$ et poser, par exemple,

$$J_1(\alpha_0, \alpha_1) = \sum_{i=1}^{N} |y_i - [\alpha_0 + \alpha_1 x_i]|$$

comme définissant une erreur globale d'approximation. Nous allons en fait plutôt considérer la somme des $carr\acute{e}s$ des erreurs et définir

$$J(\alpha_0, \alpha_1) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - [\alpha_0 + \alpha_1 x_i])^2.$$

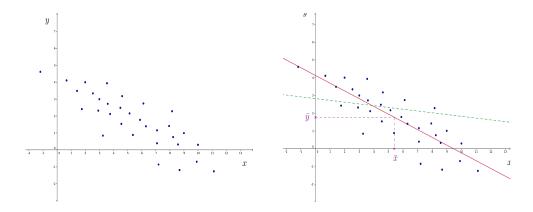


FIGURE 2.1 – Nuage de points (à gauche). À droite, la droite verte (pointillé) est une mauvaise approximation du nuage et la droite rouge (trait continu) est la droite d'approximation au sens des moindres carrés, qui passe par (\bar{x}, \bar{y}) .

On souhaite alors, si possible, trouver la droite (c'est-à-dire les coefficients α_0 , α_1) qui minimise J. On parle alors d'approximation au sens des moindres carrés.

La minimisation de J comme fonction de (α_0, α_1) rentre dans le cadre de recherche d'une pseudo-solution au sens des moindres carrés pour un problème surdéterminé. En effet, on peut écrire

$$J(\alpha_0, \alpha_1) = \left\| \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} - \alpha_0 \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} - \alpha_1 \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \right\|^2 = \|y - A(\alpha_0, \alpha_1)^T\|^2,$$

où $y = (y_1, \dots, y_N)^T \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ et (p = 2)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_N \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_{N,2}(\mathbb{R}).$$

La matrice A est de rang 2, sauf si $x_1 = x_2 = \cdots = x_N$, cas que l'on exclura dans la suite. Le théorème 2.1 s'applique donc et garantit l'existence et l'unicité (car A est injective) de $(\alpha_{0,*}, \alpha_{1,*})$ minimisant J. De plus, on peut déterminer $(\alpha_{0,*}, \alpha_{1,*})$ en résolvant le système d'équations normales

$$A^T A \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} = A^T y,$$

qui s'écrit ici

$$\begin{pmatrix} N & \sum_{i=1}^N x_i \\ \sum_{i=1}^N x_i & \sum_{i=1}^N x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N y_i \\ \sum_{i=1}^N x_i y_i \end{pmatrix}.$$

La solution de ce système est donnée par

$$\alpha_{1,*} = \frac{N \sum_{i} x_i y_i - (\sum_{i} x_i)(\sum_{i} y_i)}{N \sum_{i} x_i^2 - (\sum_{i} x_i)^2}, \qquad N\alpha_{0,*} = \sum_{i} y_i - \alpha_{1,*} \sum_{i} x_i.$$

On notera que le déterminant de la matrice A^TA vaut $N\sum_i x_i^2 - (\sum_i x_i)^2 > 0$ par l'inégalité de Cauchy(Schwarz). Cette quantité ressemble à la variance de la série (x_1, \dots, x_N) qui vaut

$$Var(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2 = \frac{1}{N^2} \det(A^T A).$$

On peut naturellement introduire les moyennes

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i, \qquad \bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} y_i$$

et définir la covariance de x et de y comme valant

$$Covar(x,y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \bar{x}\bar{y}.$$

On notera que $\operatorname{Covar}(x,x) = \operatorname{Var}(x)$. On peut alors écrire la solution $(\alpha_{0,*},\alpha_{1,*})$ du système d'équations normales sous la forme

$$\alpha_{1,*} = \frac{\operatorname{Covar}(x,y)}{\operatorname{Var}(x)}, \qquad \alpha_{0,*} = \bar{y} - \alpha_{1,*}\bar{x}.$$

Théorème 2.6. [Droite des moindres carrés] Soit $N \ge 2$, et N points (x_i, y_i) , $1 \le i \le N$, dans le plan \mathbb{R}^2 . On exclut le cas $x_1 = x_2 = \ldots = x_N$. La fonction $J : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ définie par

$$J(\alpha_0, \alpha_1) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - [\alpha_0 + \alpha_1 x_i])^2 = ||y - A(\alpha_0, \alpha_1)^T||^2$$

admet un unique point de minimum, donné par

$$\alpha_{1,*} = \frac{\operatorname{Covar}(x,y)}{\operatorname{Var}(x)}, \qquad \alpha_{0,*} = \bar{y} - \alpha_{1,*}\bar{x}.$$

La droite d'équation $y = \alpha_{0,*} + \alpha_{1,*}x$ est appelée droite d'approximation au sens des moindres carrés du nuage de points, ou encore droite de régression. Elle passe par le point (\bar{x}, \bar{y}) .

Pour notre exemple, on calcule $\bar{x} \approx 5.39875$, $\bar{y} \approx 1.771875$, $\alpha_{0,*} \approx 4.12919$, $\alpha_{1,*} \approx -0.436642$.

Remarque 2.7. Lorsque $\bar{x} = \bar{y} = 0$, la covariance de x et y vaut en fait $x \cdot y/N$. Ainsi, par l'inégalité de Cauchy(-Schwarz) $|\operatorname{Covar}(x,y)| \leq ||x|| \times ||y||/N$, avec égalité si et seulement si x et y sont colinéaires. Le cas où $\operatorname{Covar}(x,y) = 0$ est celui où les vecteurs x et y sont orthogonaux.

Il nous faut ensuite donner une mesure de la qualité de l'approximation du nuage de points par la droite des moindres carrés. En effet, si les points sont uniformément répartis sur un cercle ou dans l'intérieur d'un carré, l'approximation par une droite ne fait guère de sens. On pourrait se dire que $J(\alpha_{0,*}, \alpha_{1,*})$ mesure cette qualité d'approximation, mais elle a l'inconvénient d'être une erreur absolue, et non une erreur relative. On observe que, comme $\alpha_{0,*} = \bar{y} - \alpha_{1,*}\bar{x}$, on a

$$\frac{1}{N}J(\alpha_{0,*},\alpha_{1,*}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (y_i - [\alpha_{0,*} + \alpha_{1,*}x_i])^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} ((y_i - \bar{y}) - \alpha_{1,*}(x_i - \bar{x}))^2$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (y_i - \bar{y})^2 - 2\frac{\alpha_{1,*}}{N}\sum_{i=1}^{N} (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x}) + \frac{\alpha_{1,*}^2}{N}\sum_{i=1}^{N} (x_i - \bar{x})^2$$

$$= \operatorname{Var}(y) - 2\alpha_{1,*}\operatorname{Covar}(x,y) + \alpha_{1,*}^2\operatorname{Var}(x)$$

$$= \operatorname{Var}(y) - \frac{\operatorname{Covar}(x,y)^2}{\operatorname{Var}(x)},$$

en reportant la valeur de $\alpha_{1,*}$. Cette dernière expression est toujours entre 0 (excellente approximation) et Var(y) (mauvaise approximation). Pour avoir un nombre entre 0 (mauvaise approximation) et 1 (excellente approximation), il suffit donc de normaliser.

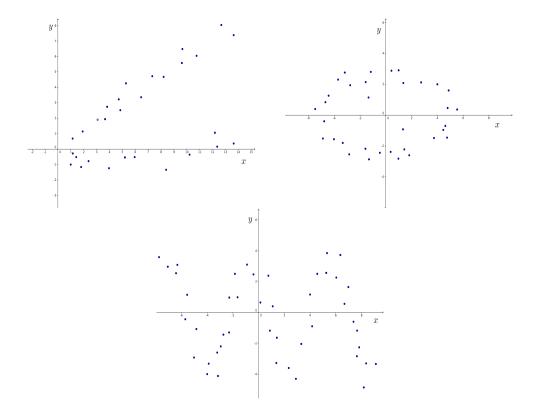


FIGURE 2.2 – Pour chaque nuage de points, par quelle fonction pourrait-on faire une approximation?

Définition 2.8. [Coefficient R^2 de détermination linéaire] Le coefficient R^2 de détermination linéaire est défini par

$$R^{2} = \frac{\operatorname{Covar}^{2}(x, y)}{\operatorname{Var}(x) \operatorname{Var}(y)} = 1 - \frac{J(\alpha_{0,*}, \alpha_{1,*})}{N \operatorname{Var}(y)} = 1 - \frac{\operatorname{dist}^{2}(y, \operatorname{Im}(A))}{N \operatorname{Var}(y)}.$$

Il est toujours entre 0 et 1. Il vaut 1 uniquement lorsque $y \in \text{Im}(A)$, autrement dit tous les points (x_i, y_i) , $1 \le i \le N$, sont alignés sur une même droite (qui est la droite des moindres carrés). Il vaut 0 uniquement lorsque Covar(x, y) = 0.

Toujours pour notre exemple, on trouve $R^2 \approx 0.703348$: l'approximation du nuage de points par la droite est donc satisfaisante. Cela peut permettre de faire des prédictions. Par exemple, si les points (x_i, y_i) représentent des valeurs expérimentales et que l'on veut savoir "la" valeur de y pour x = 6.7, on peut utiliser la droite des moindres carrés pour prédire que $y = \alpha_{0,*} + \alpha_{1,*}6.7 \approx 1.203(6)$ est une approximation raisonnable.

2.4 Autres approximations au sens des moindres carrés et utilisations

On peut faire des approximations par d'autres fonctions que des fonctions $y = \alpha_0 + \alpha_1 x$ de degré ≤ 1 . Par exemple, on pourrait utiliser des fonctions constantes $y = \alpha_0$, ou des fonctions $y = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2$ de degré ≤ 2 (voir les exercices de la feuille 2). Bien sûr, cela dépend du problème que l'on étudie et de l'allure du nuage de points. Si l'on prend les trois nuages donnés dans la figure 2.2, quel type d'approximation peut-on faire? On peut envisager les approximations données dans la figure 2.3, par une parabole ("penchée"), une

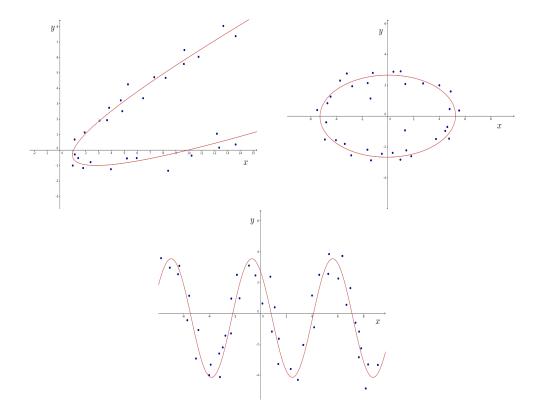


FIGURE 2.3 – Approximations : du premier nuage de points (en haut à gauche) par une parabole "penchée" (d'équation $x^2 - 5.4xy + 7.29y^2 - 11x + 9.96y = -10.56$); du deuxième nuage de points (en haut à droite) par une ellipse (d'équation $2787.81x^2 - 144.12xy + 10901.13y^2 = 77132.04$); du troisième nuage (en bas) par un polynôme trigonométrique (d'équation $y = 3\cos x - 2.4\sin x - 0.3$).

ellipse, ou encore un polynôme trigonométrique.

Par exemple, si l'on veut mettre en place une approximation pour le deuxième nuage de points de la figure 2.2 par une ellipse d'équation $\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1$ (supposée centrée en (0,0) ici pour simplifier), alors il nous faut une erreur dépendant des coefficients a et b de manière linéaire. On préfèrera donc travailler avec une équation écrite sous la forme $\alpha x^2 + \beta y^2 - 1 = 0$, avec $\alpha = 1/a^2$ et $\beta = 1/b^2$, et on peut proposer, par exemple, une erreur globale

$$J(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^{N} (\alpha x_i^2 + \beta y_i^2 - 1)^2.$$

La minimisation de J rentre là encore dans le cadre d'application du théorème 2.1. En effet, on peut écrire

$$J(\alpha, \beta) = ||A(\alpha, \beta)^T - W||^2,$$

avec

$$A = \begin{pmatrix} x_1^2 & y_1^2 \\ \vdots & \vdots \\ x_N^2 & y_N^2 \end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad W = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

On peut alors écrire le système d'équations normales et déterminer le (α_*, β_*) optimal pour cette erreur et obtenir ensuite $a_* = \alpha_*^{-1/2}$ et $b_* = \beta_*^{-1/2}$.

Il n'est attendu de vous ni de savoir par quel type de fonctions approcher un nuage de points donné, ni de savoir donner une expression de l'erreur globale : seule la droite des moindres carrés est exigible, et dans les autres cas, les fonctions et l'expression de l'erreur globale vous seront données.

Mentionnons un exemple d'application de détermination de la droite des moindres carrés lié au calcul d'ordre d'une réaction chimique. On considère une réaction chimique faisant intervenir trois composés chimiques A, B et C. On notera [A], [B] et [C] leurs concentrations. Prenons une réaction de la forme $aA + bB \rightarrow cC$, avec a, b, c entiers. Dans de nombreuses situations, la vitesse instantanée de réaction

$$v = -\frac{1}{a}\frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b}\frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c}\frac{d[C]}{dt}$$

peut se mettre sous la forme

$$v = k[A]^{\alpha}[B]^{\beta},$$

avec k > 0 et où α , β sont appelés les ordres (et ne sont pas nécessairement entiers). On souhaite déterminer (si ces nombres existent), les valeurs de k, α , β . Si l'on dispose de mesures expérimentales v_i , $[A]_i$, $[B]_i$, $1 \le i \le N$, on peut espérer pouvoir calculer k, α et β . Pour se ramener à un cadre où l'on applique le théorème 2.1, il est commode d'appliquer le logarithme pour avoir

$$\ln v = \ln k + \alpha \ln[A] + \beta \ln[B],$$

et on peut alors proposer comme erreur, en notant $K = \ln k$,

$$J(K, \alpha, \beta) = \sum_{i=1}^{N} \left(\ln v_i - K - \alpha \ln[A]_i - \beta \ln[B]_i \right)^2.$$

Notons que si l'on cherche à minimiser

$$\tilde{J}(k,\alpha,\beta) = \sum_{i=1}^{N} \left(v_i - k[A]_i^{\alpha}[B]_i^{\beta} \right)^2,$$

on ne rentre plus dans le cadre du théorème 2.1, et on n'obtient plus un système linéaire sur les paramètres (k, α, β) mais un système non linéaire. De même, si l'on ne prend pas la somme des erreurs au carré mais juste la somme des valeurs absolues des erreurs, alors on ne rentre plus dans le cadre du théorème 2.1, et on n'obtient plus un système linéaire sur les paramètres à déterminer. La méthode des moindres carrés apparaît alors comme un moyen pratique de déterminer les paramètres optimaux en résolvant un système linéaire. Le seul point est d'avoir un espace d'approximation qui est un espace vectoriel $(\mathbb{R}_1[X]$ pour la droite des moindres carrés, ou $\mathbb{R}_2[X]$ si l'on veut un polynôme de degré ≤ 2 , $\mathrm{Vect}(x^2, y^2, 1)$ pour l'ellipse précédente, etc.).

Les logiciels standards possèdent des routines de calcul toutes faites pour le calcul d'une pseudo-solution au sens des moindres carrés ou pour le calcul de la droite des moindres carrés (ou droite de régression linéaire). Par exemple :

- R: commandes LM pour la régression linéaire usuelle (voir aussi RSQUARED ou COEF_DET pour le coefficient de détermination linéaire).
- Python: importer Numpy, puis le module LinearRegression de sklearn.linear_model.
- \bullet Scilab: commandes REGLIN et LEASTSQ.
- Maple: importer le module Statistics et utiliser la commande LinearFit.

On termine ce chapitre avec quelques dates et personnages. La méthode des moindres carrés a été décrite par A.-M. Legendre en 1805 ([9]), alors que C. F. Gauss prétend l'avoir utilisée dès 1794 ou 1795, mais il ne publie sa méthode qu'en 1809 ([3]). A.-M. Legendre a développé la méthode pour déterminer des orbites de

comète (le problème est de trouver les paramètres d'une trajectoire elliptique dans un contexte plus complexe que celui évoqué ci-dessus). Pour C. F. Gauss, le problème était de déterminer (vers 1794-1795) l'excentricité de la Terre (assimilée à une ellipse), en lien avec le calcul de la longueur du méridien terrestre (qui sert de base à la définition du mètre); en 1809, il a également appliqué la méthode pour la détermination d'orbites célestes.

Le coefficient \mathbb{R}^2 de détermination linéaire apparaît dans les travaux de Auguste Bravais (1811-1863, français) en 1844 ([1]), ainsi que chez Francis Galton (1822-1911, britannique) vers 1888 (cf. [2]). C'est Karl Pearson (1857-1936, britannique) en 1896 ([12]) qui popularisera la notion.

Chapitre 3

Matrices orthogonales, isométries, et décompositions matricielles

3.1 Matrices orthogonales, isométries

Dans cette section, nous introduisons une classe particulière de matrices en lien étroit avec les bases orthonormées. Si $A \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R})$ et $1 \leq i \leq N$, $1 \leq j \leq p$, on notera $A_{i,:} = (A_{i,1}, \ldots, A_{i,p}) \in \mathbb{R}^p = \mathcal{M}_{1,p}(\mathbb{R})$ la i-ème ligne de A et $A_{::,j} = (A_{1,j}, \ldots, A_{N,j})^T \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ la j-ème colonne de A.

Définition 3.1. Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$. On dit que A est orthogonale si $A^TA = I_N$. Autrement dit, A est inversible et $A^{-1} = A^T$.

Proposition 3.2. [Caractérisations des matrices orthogonales] Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$. Les assertions suivantes sont équivalentes :

- (i) la matrice A est orthogonale;
- (ii) $AA^T = I_N$;
- (iii) les colonnes de A forment une base orthonormée de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$;
- (iv) les lignes de A forment une base orthonormée de $\mathbb{R}^N = \mathcal{M}_{1,N}(\mathbb{R})$;
- (v) pour tout $X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, on a ||AX|| = ||X||;
- (vi) pour tous $X, Y \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, on $a(AX) \cdot (AY) = X \cdot Y$.

Preuve. (i) \Leftrightarrow (ii) Par hypothèse, A est inversible (à gauche ou à droite) et $A^{-1} = A^T$, donc $AA^T = AA^{-1} = I_N$ ou $A^TA = A^{-1}A = I_N$.

 $(i) \Leftrightarrow (iii) \text{ Pour } 1 \leqslant i, j \leqslant N, \text{ on a}$

$$(A^T A)_{i,j} = \sum_{k=1}^{N} (A^T)_{i,k} A_{k,j} = \sum_{k=1}^{N} A_{k,i} A_{k,j} = A_{:,i} \cdot A_{:,j}.$$

Ainsi, (i) $A^T A = I_N$ signifie exactement que, pour $1 \le i, j \le N$, on a $(A^T A)_{i,j} = A_{:,i} \cdot A_{:,j} = \delta_{i,j}$, autrement dit les colonnes de A forment une base orthonormée de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$.

- $(ii) \Leftrightarrow (iv)$ C'est un calcul semblable au précédent.
- $(vi) \Rightarrow (v)$ Il suffit de faire Y = X.
- $(v) \Rightarrow (vi)$ On utilise la formule de polarisation (voir proposition 1.5 (iii)). Pour $X, Y \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, on a

$$\begin{aligned} 4(AX) \cdot (AY) &= \|AX + AY\|^2 - \|AX - AY\|^2 \\ &= \|A(X + Y)\|^2 - \|A(X - Y)\|^2 \\ &= \|X + Y\|^2 - \|X - Y\|^2 \quad \text{par } (v) \\ &= 4X \cdot Y \quad \text{par polarisation.} \end{aligned}$$

 $(i) \Rightarrow (v)$ On utilise la formule vue au tout début de la section 1.6, qui dit que pour $X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, on a

$$X \cdot (A^T A X) = ||AX||^2.$$

Ainsi, lorsque A est orthogonale, on a $A^TA = I_N$, et on a bien $||AX||^2 = X \cdot (A^TAX) = X \cdot X = ||X||^2$. $(vi) \Rightarrow (i)$ On utilise l'autre formule vue au tout début de la section 1.6, qui dit que pour $U, V \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$,

$$U \cdot (AV) = (A^T U) \cdot V.$$

Par conséquent, pour tous $X, Y \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, on a (par (vi))

$$X \cdot Y = (AX) \cdot (AY) = (A^T AX) \cdot Y.$$

Pour $X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ donné, on a donc $((A^TAX) - X) \cdot Y = 0$ quelle que soit $Y \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, ce qui entraı̂ne $(A^TAX) - X = 0 = (A^TA - I_N)X$. Puisque cela vaut quelle que soit $X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, on en déduit que $A^T A - I_N = 0$, ce qui conclut.

Exemple 3.3. La matrice

$$A = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2\\ 2 & 2 & -1\\ -1 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

est orthogonale : il suffit de calculer $A^T A$ (ou AA^T) pour voir que cela fait I_3 .

À cette définition portant sur les matrices correspond un analogue pour les endomorphismes de \mathbb{R}^N .

Définition 3.4. Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$. On dit que u est une isométrie si, quel que soit $x \in \mathbb{R}^N$, on a ||u(x)|| = ||x||.

Notons qu'une isométrie de \mathbb{R}^N est nécessairement injective (si $x \in \text{Ker}(u)$, alors u(x) = 0, et donc ||x|| = ||u - x|| = 0, d'où x = 0), donc bijective puisque u est un endomorphisme en dimension finie.

Proposition 3.5. [Caractérisations des isométries] Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$. Les assertions suivantes sont équivalentes :

- (i) u est une isométrie;
- (ii) pour tout $x, y \in \mathbb{R}^N$, on a $u(x) \cdot u(y) = x \cdot y$;
- (iii) il existe une base orthonormée de \mathbb{R}^N dans laquelle la matrice de u est une matrice orthogonale;
- (iv) pour toute base orthonormée de \mathbb{R}^N , la matrice de u dans cette base est une matrice orthogonale; (v) il existe une base orthonormée de \mathbb{R}^N dont l'image par u est une base orthonormée de \mathbb{R}^N ;
- (vi) l'image de toute base orthonormée de \mathbb{R}^N par u est une base orthonormée de \mathbb{R}^N .

Preuve. $(ii) \Leftrightarrow (i)$ se montre comme pour les matrices orthogonales via la formule de polarisation.

 $(v) \Rightarrow (i)$ Soit (b_1, \ldots, b_N) une base orthonormée de \mathbb{R}^N dont l'image par u est aussi une base orthonormée de \mathbb{R}^N . Pour $x \in \mathbb{R}^N$, on sait par la proposition 1.24 que $x = \sum_{j=1}^N (x \cdot b_j) b_j$, donc, puisque u est linéaire, $u(x) = \sum_{j=1}^{N} (x \cdot b_j) u(b_j)$. Par hypothèse, $(u(b_1), \dots, u(b_N))$ est aussi une base orthonormée de \mathbb{R}^N , donc, toujours par la proposition 1.24, on trouve

$$||u(x)||^2 = \sum_{j=1}^{N} (x \cdot b_j)^2 = ||x||^2,$$

ce qui prouve que u est une isométrie.

 $(vi) \Rightarrow (v)$ Il suffit de choisir une base orthonormée de \mathbb{R}^N (par exemple la base canonique).

 $(i) \Rightarrow (vi)$ Soit (b_1, \ldots, b_N) une base orthonormée de \mathbb{R}^N quelconque et $1 \leqslant i, j \leqslant N$. Puisque (i) est vrai, (ii)aussi, et donc $u(b_i) \cdot u(b_j) = b_i \cdot b_j = \delta_{i,j}$, ce qui montre que $(u(b_1), \dots, u(b_N))$ est une famille orthonormée de \mathbb{R}^N , ayant pour cardinal $N = \dim(\mathbb{R}^N)$, donc $(u(b_1), \dots, u(b_N))$ est une base orthonormée de \mathbb{R}^N .

 $(ii) \Rightarrow (iv)$ Soit (b_1, \dots, b_N) une base orthonormée de \mathbb{R}^N quelconque. La matrice $A = (A_{i,j})_{1 \leqslant i,j \leqslant N}$ de u dans la base (b_1, \dots, b_N) vérifie $A_{i,j} = u(b_j) \cdot b_i$ à cause de la décomposition $u(b_j) = \sum_{i=1}^N (u(b_j) \cdot b_i) b_i$ en base orthonormée (proposition 1.24). Soit donc $1 \leqslant i,j \leqslant N$ et calculons le produit scalaire des colonnes

$$A_{:,i} \cdot A_{:,j} = \sum_{k=1}^{N} A_{k,i} A_{k,j} = \sum_{k=1}^{N} (u(b_i) \cdot b_k) \times (u(b_j) \cdot b_k) = u(b_i) \cdot u(b_j) = \delta_{i,j},$$

la troisième égalité découlant de la proposition 1.24 (la base (b_1, \ldots, b_N) de \mathbb{R}^N est orthonormée). Cela montre que les colonnes de A forment une base orthonormée de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, et donc que A est orthogonale par la proposition 3.2 précédente.

 $(iv) \Rightarrow (iii)$ Il suffit de choisir une base orthonormée de \mathbb{R}^N (par exemple la base canonique).

 $(iii) \Rightarrow (i)$ Il existe, par hypothèse, une base (b_1, \ldots, b_N) orthonormée de \mathbb{R}^N dans laquelle la matrice $A = (A_{i,j})_{1 \leqslant i,j \leqslant N} = (u(b_j) \cdot b_i)_{1 \leqslant i,j \leqslant N}$ de u est orthogonale. Montrons que u est une isométrie. Soit donc $x \in \mathbb{R}^N$. Dans la base orthonormée (b_1, \ldots, b_N) , x est représenté par la colonne $(x \cdot b_1, \ldots, x \cdot b_N)^T$ et u est représenté par la matrice A, donc u(x) est représenté par la colonne $A(x \cdot b_1, \ldots, x \cdot b_N)^T$, c'est-à-dire

$$u(x) = \sum_{j=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{N} (x \cdot b_k) A_{j,k} \right) b_j = \sum_{j=1}^{N} \left((x \cdot b_1, \dots, x \cdot b_N) \cdot A_{j,:} \right) b_j.$$

Puisque (b_1, \ldots, b_N) est une base orthonormée de \mathbb{R}^N , la proposition 1.24 donne

$$||u(x)||^2 = \sum_{j=1}^N \left((x \cdot b_1, \dots, x \cdot b_N) \cdot A_{j,:} \right)^2$$

$$= ||(x \cdot b_1, \dots, x \cdot b_N)||^2 \qquad \text{(car les lignes de A forment une base orthonormée)}$$

$$= \sum_{i=1}^N (x \cdot b_i)^2 = ||x||^2.$$

Donc u est bien une isométrie.

Exemple 3.6. Dans \mathbb{R}^2 , les endomorphismes u et s définis par

$$u(x,y) = \left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}, \frac{x-y}{\sqrt{2}}\right)$$
 et $s(x,y) = (x,-y)$

sont des isométries. En effet, u et s sont clairement linéaires. De plus, pour $(x,y) \in \mathbb{R}^2$, on a

$$||s(x,y)||^2 = x^2 + (-y)^2 = ||(x,y)||^2$$

et, en développant,

$$||u(x,y)||^2 = \left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}\right)^2 + \left(\frac{x-y}{\sqrt{2}}\right)^2 = x^2 + y^2 = ||(x,y)||^2.$$

Pour u, on aurait également pu remarquer que sa matrice dans la base canonique (qui est orthonormée) est

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

et que A est orthogonale puisque $A^T A = I_2$.

Proposition 3.7. (i) Si A et $B \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ sont des matrices orthogonales (donc inversibles), alors AB et A^{-1} sont aussi orthogonales.

(ii) Si u et $v \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$ sont des isométries de \mathbb{R}^N (donc inversibles), alors $u \circ v$ et u^{-1} sont aussi des isométries.

Remarque 3.8. Si vous suivez l'ECUE Structures algébriques, la proposition 3.7 montre que l'ensemble $\mathcal{O}_N(\mathbb{R})$ des matrices orthogonales forme un sous-groupe de $\mathrm{GL}_N(\mathbb{R})$.

Preuve. On prouve (i), car (ii) est analogue. On sait donc que $A^TA = B^TB = I_N$, donc

$$(AB)^{T}(AB) = B^{T}A^{T}AB = B^{T}(A^{T}A)B = B^{T}B = I_{N},$$

ce qui montre que AB est orthogonale. De même, comme A est inversible et $A^{-1} = A^{T}$, on a

$$(A^{-1})^T A^{-1} = (A^T)^T A^{-1} = AA^{-1} = I_N,$$

ce qui montre que A^{-1} est orthogonale.

3.2 Valeur propre, vecteur propre, sous-espace propre et théorème spectral

La notion de valeur propre et de vecteur propre est une notion fondamentale pour comprendre un endomorphisme ou une matrice carrée.

Définition 3.9. [Valeur propre, vecteur propre]

- (i) Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^{\dot{N}})$ et $\lambda \in \mathbb{R}$. On dit que λ est une valeur propre de u s'il existe $x \in \mathbb{R}^{N}$ non nul tel que $u(x) = \lambda x$. Un tel x est appelé un vecteur propre de u associé à la valeur propre λ . On dit aussi que (λ, x) est un couple propre pour u.
- (ii) Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ et $\lambda \in \mathbb{R}$. On dit que λ est une valeur propre de A s'il existe $X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ non nul telle que $AX = \lambda X$. Un tel vecteur colonne X est appelé un vecteur propre de A associé à la valeur propre λ . On dit aussi que (λ, X) est un couple propre pour A.

Ainsi, lorsque x est un vecteur propre de u, la droite engendrée par u est invariante par u.

Exemple 3.10. Dans \mathbb{R}^2 , l'endomorphisme f défini par

$$f(x,y) = (3y - x, x + y)$$

admet $\lambda = 2$ comme valeur propre car f(1,1) = 2(1,1).

Proposition 3.11. Pour $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$ et $\lambda \in \mathbb{R}$, on a équivalence entre

- (i) λ est valeur propre de u;
- (ii) $\operatorname{Ker}(u \lambda Id_{\mathbb{R}^N}) \neq \{0\}$;
- (iii) $u \lambda Id_{\mathbb{R}^N}$ n'est pas inversible;
- $(iv) \det(\lambda Id_{\mathbb{R}^N} u) = 0.$

De même, pour $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ et $\lambda \in \mathbb{R}$, on a équivalence entre

- (i) λ est valeur propre de A;
- (ii) $\operatorname{Ker}(A \lambda I_{\mathbb{R}^N}) \neq \{0\}$;
- (iii) $A \lambda I_{\mathbb{R}^N}$ n'est pas inversible;
- $(iv) \det(\lambda I_{\mathbb{R}^N} A) = 0.$

Preuve. L'équivalence entre (i) et (ii) est simplement la définition de valeur propre. Pour un endomoprhisme en dimension finie v, on sait qu'il y a équivalence entre v injectif, v surjectif et v bijectif (c'est une conséquence du théorème du rang), d'où $(ii) \Leftrightarrow (iii)$. Enfin, on sait que le déterminant nul caractérise les endomorphismes non inversibles.

Définition 3.12. [Polynôme caractéristique] (i) Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$. On appelle polynôme caractéristique de u le déterminant $\chi_u(\lambda) = \det(\lambda Id_{\mathbb{R}^N} - u)$.

(ii) Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$. On appelle polynôme caractéristique de A le déterminant $\chi_A(\lambda) = \det(\lambda I_N - A)$.

Proposition 3.13. (i) Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$. Les valeurs propres de u sont les racines du polynôme caractéristique χ_u de u.

- (ii) Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$. Les valeurs propres de A sont les racines réelles 1 du polynôme caractéristique χ_A de A.
- (iii) Pour $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$, le polynôme caractéristique de u est égal au polynôme caractéristique de la matrice de u dans n'importe quelle base de \mathbb{R}^N .

Preuve. En effet, si $v \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$, alors det v est par définition le déterminant de la matrice de v dans n'importe quelle base de \mathbb{R}^N (avec ici $v = u - \mathrm{Id}_{\mathbb{R}^N}$. Cela est possible car si $P \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ est inversible et $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$, alors $\det(PAP^{-1}) = \det(P) \det(A) \det(P^{-1}) = \det A$.

Définition 3.14. [Sous-espace propre] Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$ et $\lambda \in \mathbb{R}$ une valeur propre de u. On appelle sous-espace propre de u relativement à la valeur propre λ le sous-espace vectoriel $\text{Ker}(u - \lambda Id_{\mathbb{R}^N})$. Celui-ci n'est pas réduit à $\{0\}$.

Exemple 3.15. On considère toujours (voir l'exemple 3.15) l'endomorphisme f de \mathbb{R}^2 défini par

$$f(x,y) = (3y - x, x + y).$$

Sa matrice dans la base canonique est

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Son polynôme caractéristique vaut donc

$$\chi_f(\lambda) = \chi_A(\lambda) = \det(\lambda I_2 - A) = \begin{vmatrix} \lambda + 1 & -3 \\ -1 & \lambda - 1 \end{vmatrix} = \lambda^2 - 4.$$

On retrouve bien le fait que 2 est valeur propre. Il y a donc une autre valeur propre : -2. On peut rechercher les sous-espaces propres. Tout d'abord, pour la valeur propre 2 :

$$(x,y)^T \in \text{Ker}(A-2I_2) \Leftrightarrow \begin{cases} 3y-3x = 0 \\ x-y = 0 \end{cases} \Leftrightarrow (x,y)^T \in \text{Vect}\left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}\right),$$

donc

$$\operatorname{Ker}(A - 2I_2) = \operatorname{Vect}\left(\begin{pmatrix} 1\\1 \end{pmatrix}\right)$$

Pour la valeur propre -2, on trouve

$$(x,y)^T \in \operatorname{Ker}(A+2I_2) \Leftrightarrow \begin{cases} 3y+x=0\\ x+3y=0 \end{cases} \Leftrightarrow (x,y)^T \in \operatorname{Vect}\left(\begin{pmatrix} 3\\ -1 \end{pmatrix}\right),$$

donc

$$\operatorname{Ker}(A + 2I_2) = \operatorname{Vect}\left(\begin{pmatrix} 3\\ -1 \end{pmatrix}\right).$$

Par exemple, (-6,2) = -2(3,-1) est un vecteur propre de f pour la valeur propre -2.

Remarque 3.16. La différence entre $\operatorname{Ker}(u - \lambda \operatorname{Id}_{\mathbb{R}^N})$ et les vecteurs propres associés à la valeur propre λ est que 0 est dans $\operatorname{Ker}(u - \lambda \operatorname{Id}_{\mathbb{R}^N})$ mais n'est pas un vecteur propre. Ainsi, l'ensemble des vecteurs propres associés à la valeur propre λ est $\operatorname{Ker}(u - \lambda \operatorname{Id}_{\mathbb{R}^N}) \setminus \{0\}$.

Dans la suite du chapitre, nous allons nous concentrer sur le cas des matrices symétriques et des endomorphismes autoadjoints.

^{1.} On pourrait envisager une valeur propre λ complexe, avec un vecteur propre associé complexe. Cela n'arrivera pas dans ce cours de Compléments d'Algèbre Linéaire. Une étude plus approfondie des valeurs propres (incluant les λ complexes) sera faite dans l'UE Algèbre Linéaire II (SPUM 405) du S4.

Proposition 3.17. [Orthogonalité de sous-espaces propres associés à des valeurs propres distinctes] (i) Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$ autoadjoint et λ , $\mu \in \mathbb{R}$ deux valeurs propres distinctes de u. Alors, les sous-espaces propres $\operatorname{Ker}(u - \lambda Id_{\mathbb{R}^N})$ et $\operatorname{Ker}(u - \mu Id_{\mathbb{R}^N})$ sont orthogonaux.

(ii) Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ symétrique et λ , $\mu \in \mathbb{R}$ deux valeurs propres distinctes de A. Alors, les sous-espaces propres $\operatorname{Ker}(A - \lambda Id_{\mathbb{R}^N})$ et $\operatorname{Ker}(A - \mu Id_{\mathbb{R}^N})$ sont orthogonaux.

Preuve. On prouve (i), car (ii) est analogue. Soit donc $x \in \text{Ker}(u - \lambda \text{Id}_{\mathbb{R}^N})$ et $y \in \text{Ker}(u - \mu \text{Id}_{\mathbb{R}^N})$ et montrons qu'ils sont orthogonaux. Comme u est supposé autoadjoint, on a $u(x) \cdot y = x \cdot u(y)$, ce qui donne, puisque $u(x) = \lambda x$ et $u(y) = \mu y$, $\lambda x \cdot y = \mu x \cdot y$, ou encore $(\lambda - \mu)x \cdot y = 0$. Étant donné que $\lambda \neq \mu$, on déduit, comme voulu, que $x \cdot y = 0$.

Théorème 3.18. (i) Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$ autoadjoint. Alors

$$\mu = \inf\{u(x) \cdot x | x \in \mathbb{R}^N \ t.q. \ ||x|| = 1\}$$
 et $\lambda = \sup\{u(x) \cdot x | x \in \mathbb{R}^N \ t.q. \ ||x|| = 1\}$

sont des valeurs propres de u.

(ii) Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ symétrique. Alors

$$\mu = \inf\{(AX) \cdot X | X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) \ t.q. \ ||X|| = 1\}$$
 et $\lambda = \sup\{(AX) \cdot X | X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) \ t.q. \ ||X|| = 1\}$

sont des valeurs propres de A.

Preuve. On détaille la preuve pour μ , le cas de λ étant analogue. Supposons, dans une première étape, que μ soit atteint en un $X_* \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ tel que $\|X_*\| = 1$ et montrons que X_* est un vecteur propre pour μ . Déjà, $X_* \neq 0$ puisque $\|X_*\| = 1$. Fixons ensuite $1 \leq k \leq N$, et notons e_k le k-ième vecteur de base canonique de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$. Par inégalité triangulaire, on a

$$1 = ||X_*|| = ||(X_* + te_k) - te_k|| \le ||X_* + te_k|| + || - te_k|| = ||X_* + te_k|| + |t|,$$

donc, si |t| < 1, il vient $||X_* + te_k|| \ge 1 - |t| > 0$. On peut donc considérer la fonction $F:]-1, +1[\to \mathbb{R}$ définie par

$$F(t) = \frac{(A(X_* + te_k)) \cdot (X_* + te_k)}{\|X_* + te_k\|^2}.$$

Vu que

$$F(t) = \left(A\frac{X_* + te_k}{\|X_* + te_k\|}\right) \cdot \frac{X_* + te_k}{\|X_* + te_k\|},$$

avec $\frac{X_*+te_k}{\|X_*+te_k\|}$ normé, on déduit $F(t) \ge \mu$ pour $t \in]-1,+1[$. Par ailleurs, comme X_* est normé, on a $F(0) = \mu$: la fonction F admet donc un minimum en t = 0. On s'intéresse donc (si cela existe) à F'(0), qui doit alors être nul. Pour $t \to 0$, on a, d'une part,

$$(A(X_* + te_k)) \cdot (X_* + te_k) = (AX_*) \cdot X_* + t(AX_*) \cdot e_k + tX_* \cdot (Ae_k) + t^2(Ae_k) \cdot e_k.$$

Or, par une formule vue au tout début de la section 1.6 et puisque A est supposée symétrique, on a

$$X_* \cdot (Ae_k) = (A^T X_*) \cdot e_k = (AX_*) \cdot e_k = (AX_*)_k$$

donc

$$(A(X_* + te_k)) \cdot (X_* + te_k) = \mu + 2t(AX_*)_k + o(t).$$

D'autre part, par la formule d'Al-Kashi,

$$||X_* + te_k||^2 = ||X_*||^2 + 2tX_* \cdot e_k + ||te_k||^2 = 1 + 2tX_{*,k} + o(t).$$

Par conséquent,

$$F(t) = \frac{\left(A(X_* + te_k)\right) \cdot (X_* + te_k)}{\|X_* + te_k\|^2}$$

$$= \frac{\mu + 2t(AX_*)_k + o(t)}{1 + 2tX_{*,k} + o(t)}$$

$$= (\mu + 2t(AX_*)_k + o(t))(1 - 2tX_{*,k} + o(t))$$

$$= \mu + 2t((AX_*)_k - \mu X_{*,k}) + o(t).$$

Cela veut dire que F est dérivable en t=0, avec $F'(0)=2((AX_*)_k-\mu X_{*,k})$. Or, t=0 est un point de minimum, donc $F'(0)=2((AX_*)_k-\mu X_{*,k})=0$, ou encore $(AX_*)_k=\mu X_{*,k}$. Comme cela vaut quel que soit $1 \le k \le N$, on a bien $AX_*=\mu X_*$, c'est-à-dire que X_* est bien un vecteur propre pour la valeur propre μ .

Dans une deuxième étape, on montre que μ existe. On applique pour cela le théorème de la borne inférieure : toute partie de \mathbb{R} non vide et minorée admet une borne inférieure. Il est clair que $E = \{(AX) \cdot X | X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) \text{ t.q. } ||X|| = 1\}$ est une partie de \mathbb{R} non vide (elle contient $(Ae_1) \cdot e_1$, par exemple). On cherche ensuite à minorer E. Pour $X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ tel que ||X|| = 1, l'inégalité de Cauchy(-Schwarz) donne

$$|(AX) \cdot X| \le ||AX|| \times ||X|| = ||AX||.$$

En outre, par une nouvelle application de l'inégalité de Cauchy(-Schwarz) écrite sous la forme

$$\left(\sum_{j=1}^{N} u_j v_j\right)^2 = (u \cdot v)^2 \leqslant ||u||^2 \times ||v||^2 = \left(\sum_{j=1}^{N} u_j^2\right) \times \left(\sum_{j=1}^{N} v_j^2\right),$$

il vient

$$||AX||^2 = \sum_{i=1}^N (AX)_i^2 = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^N A_{i,j}X_j\right)^2 \leqslant \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j=1}^N A_{i,j}^2\right) \times \left(\sum_{j=1}^N X_j^2\right) = \sum_{i=1}^N A_{i,j}^2.$$

Ainsi, on a

$$(AX) \cdot X \geqslant -|(AX) \cdot X| \geqslant -\sqrt{\sum_{i,j=1}^{N} A_{i,j}^2}$$

ce qui assure que E est minoré par $-\sqrt{\sum_{i,j=1}^{N}A_{i,j}^2}$. Par conséquent, μ est bien défini comme borne inférieure.

Dans une troisième étape, on montre que μ est atteint. Cela va reposer sur le théorème de Bolzano-Weierstrass : toute suite bornée de réels admet une sous-suite convergente. D'après la caractérisation des bornes inférieures, il existe une suite 2 $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ d'éléments de \mathbb{R}^N vérifiant $\|X_n\|=1$ quel que soit $n\in\mathbb{N}$ et $(AX_n)\cdot X_n\to \mu$ quand $n\to +\infty$. On observe que $1=\|X_n\|^2=\sum_{j=1}^N X_{n,j}^2$, donc toutes les coordonnées de X_n sont dans [-1,+1]. Par le théorème de Bolzano-Weierstrass appliqué à la suite bornée $(X_{n,1})_{n\in\mathbb{N}}$, il existe donc une extractrice 3 $\varphi_1:\mathbb{N}\to\mathbb{N}$ et un réel $X_{*,1}$ tel que $X_{\varphi_1(n),1}\to X_{*,1}$ quand $n\to +\infty$. Par le théorème de Bolzano-Weierstrass appliqué cette fois-ci à la suite bornée $(X_{\varphi_1(n),2})_{n\in\mathbb{N}}$, il existe une autre extractrice $\varphi_2:\mathbb{N}\to\mathbb{N}$ et un réel $X_{*,2}$ tel que $X_{\varphi_1\circ\varphi_2(n),2}\to X_{*,2}$ quand $n\to +\infty$. Notons que $X_{\varphi_1\circ\varphi_2(n),1}\to X_{*,1}$ si $n\to +\infty$ comme sous-suite d'une suite convergente vers $X_{*,1}$. On continue en appliquant le théorème de Bolzano-Weierstrass à la suite bornée $(X_{\varphi_1\circ\varphi_2(n),3})_{n\in\mathbb{N}}$, puis $(X_{\varphi_1\circ\varphi_2\circ\varphi_3(n),4})_{n\in\mathbb{N}}$, etc., jusqu'à obtenir l'extractrice φ_N et les réels $X_{*,j},1\leqslant j\leqslant N$, tels que $X_{\varphi_1\circ\varphi_2\circ\ldots\circ\varphi_N(n),j}\to X_{*,j}$. On note $\varphi=\varphi_1\circ\varphi_2\circ\ldots\circ\varphi_N$

^{2.} Une telle suite est appelée suite minimisante

^{3.} C'est-à-dire une application strictement croissante

qui est une extractrice (comme composition d'applications strictement croissantes de \mathbb{N} dans \mathbb{N}). Montrons, pour conclure, que $X_* = (X_{*,1}, \dots, X_{*,N})^T \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ convient. On a, d'une part

$$1 = \sum_{j=1}^{N} X_{\varphi(n),j}^2 \to \sum_{j=1}^{N} X_{*,j}^2 = ||X_*||^2,$$

donc, par unicité de la limite, $||X_*|| = 1$. D'autre part, $(AX_{\varphi(n)}) \cdot X_{\varphi(n)} \to \mu$ (comme sous-suite d'une suite qui converge vers μ), et

$$(AX_{\varphi(n)}) \cdot X_{\varphi(n)} = \sum_{i=1}^{N} (AX_{\varphi(n)})_i X_{\varphi(n),i} = \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{j=1}^{N} A_{i,j} X_{\varphi(n),j} \right) X_{\varphi(n),i}$$

$$\to \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{j=1}^{N} A_{i,j} X_{*,j} \right) X_{*,i} = (AX_*) \cdot X_*.$$

Par unicité de la limite, on déduit donc

$$\mu = (AX_*) \cdot X_*.$$

On a donc bien montré que l'infimum μ est atteint en X_* .

Le théorème 3.18 précédent nous assure l'existence de valeur(s) propre(s) pour une matrice réelle symétrique ou un endomorphisme autoadjoint. Nous allons en déduire un résultat fondamental, dont on donne une formulation pour les endomorphismes autoadjoints.

Théorème 3.19. [Théorème spectral pour un endomorphisme autoadjoint] Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$ un endomorphisme autoadjoint.

(i) Il existe $r \in \mathbb{N}^*$, $\lambda_1 < \ldots < \lambda_r \in \mathbb{R}$ et $m_1, \ldots, m_r \in \mathbb{N}^*$ tels que $m_1 + \ldots + m_r = N$ et

$$\chi_u(\lambda) = \prod_{j=1}^r (\lambda - \lambda_j)^{m_j}.$$

En particulier, le polynôme χ_u n'a que des racines réelles (on dit qu'il est scindé sur \mathbb{R}). Les λ_j , $1 \leqslant j \leqslant r$, sont les valeurs propres distinctes de u.

(ii) Si, pour chaque $1 \leq j \leq r$, \mathcal{B}_j est une base orthonormée du sous-espace propre $\mathrm{Ker}(u-\lambda_j Id_{\mathbb{R}^N})$, alors la concaténation \mathcal{B} de ces r familles forme une base orthonormée de \mathbb{R}^N dans laquelle la matrice de u est diagonale :

$$Mat(u, \mathcal{B}) = Diag(\lambda_1, \dots, \lambda_1, \dots, \lambda_r, \dots, \lambda_r),$$

où la matrice diagonale contient m_1 fois λ_1, \ldots, m_r fois λ_r . En conséquence, pour $1 \leq j \leq r$,

$$m_i = \dim \operatorname{Ker}(u - \lambda_i Id_{\mathbb{R}^N}).$$

(iii) Il existe une base orthonormée de vecteurs propres de u.

On donne ensuite une formulation pour les matrices symétriques.

Théorème 3.20. [Théorème spectral pour une matrice réelle symétrique] Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ une matrice réelle symétrique.

(i) Il existe $Q \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ orthogonale et $\lambda_1, \ldots, \lambda_N \in \mathbb{R}$ tels que

$$A = QDiag(\lambda_1, \dots, \lambda_N)Q^T$$
.

(ii) On a

$$\chi_A(\lambda) = \prod_{j=1}^N (\lambda - \lambda_j).$$

Si μ est une valeur propre de A, alors $\dim \operatorname{Ker}(A - \mu I_N)$ est égal à la multiplicité de μ dans le polynôme caractéristique χ_A (c'est-à-dire le nombre de j tels que $\lambda_j = \mu$). (iii) Il existe une base orthonormée de vecteurs propres de A.

Les deux théorèmes sont en fait équivalents. Dans le théorème 3.20, les valeurs propres ne sont pas a priori distinctes (il y en a donc N) alors que les λ_j du théorème 3.19 sont les valeurs propres distinctes (il y en a donc r et la somme des multiplicités fait donc N). On passe de l'énoncé sur les matrices à l'énoncé sur les endomorphismes autoadjoints en exploitant que leurs matrices en base orthonormée (cela existe) sont (réelles et) symétriques. Réciproquement, une matrice (réelle et) symétrique est la matrice de l'endomorphisme canoniquement associé, qui est donc autoadjoint. Insistons sur le fait que le théorème 3.20 est spécifique au cas réel et symétrique. Si l'on a l'écriture (ii) du théorème 3.19 (resp. l'écriture (i) du théorème 3.20)s, on dit que l'on a diagonalisé u (resp. A).

Preuve. On détaille la preuve du théorème 3.20 pour une matrice réelle symétrique (le cas des endomorphismes autoadjoints s'en déduit). On considère donc $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ (réelle et) symétrique.

(i) On procède par récurrence sur N, le résultat étant évident si N=1.

Par le théorème 3.18, on sait que A possède au moins une valeur propre λ_1 . On note Y un vecteur propre associé, que l'on peut supposer normé. Le sous-espace vectoriel (hyperplan) $\{Y\}^{\perp}$ de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ possède, par le corollaire 1.32, une base orthonormée (Z_1,\ldots,Z_{N-1}) . On vérifie alors sans peine que (Y,Z_1,\ldots,Z_{N-1}) est une base orthonormée de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$. Par conséquent, la matrice Q_1 dont les colonnes sont Y,Z_1,\ldots,Z_{N-1} est orthogonale (voir la proposition 3.2). Puisque $AY = \lambda_1 Y$, on a l'égalité matricielle (traduisant un changement de base orthogonale)

$$Q_1^{-1}AQ_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & v \\ 0 & A' \end{pmatrix},$$

avec $A' \in \mathcal{M}_{N-1}(\mathbb{R})$ et $v \in \mathcal{M}_{1,N-1}(\mathbb{R})$. Notons que A est symétrique et que Q_1 est orthogonale $(Q_1^{-1} = Q_1^T)$, donc $Q_1^{-1}AQ_1$ est aussi symétrique :

$$(Q_1^{-1}AQ_1)^T = (Q_1^TAQ_1)^T = Q_1^TA^TQ_1 = Q_1^TAQ_1.$$

Cela entraı̂ne $v = 0 \in \mathcal{M}_{1,N-1}(\mathbb{R})$ et $(A')^T = A' : A' \in \mathcal{M}_{N-1}(\mathbb{R})$ est donc symétrique. Par hypothèse de récurrence (pour A'), il existe donc $Q' \in \mathcal{M}_{N-1}(\mathbb{R})$ orthogonale et $\lambda_2, \ldots, \lambda_N \in \mathbb{R}$ tels que

$$A' = Q' \operatorname{Diag}(\lambda_2, \dots, \lambda_N) (Q')^T = Q' D' (Q')^T \in \mathcal{M}_{N-1}(\mathbb{R}).$$

On définit alors

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q' \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R}),$$

qui est orthogonale car

$$\tilde{Q}^T \tilde{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (Q')^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (Q')^T Q' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \mathbf{I}_{N-1} \end{pmatrix} = \mathbf{I}_N$$

(on peut aussi voir que ses colonnes forment une famille orthonormée de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$). On obtient alors

$$Q_1^{-1}AQ_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & A' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & Q'D'(Q')^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & D' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q' \end{pmatrix}^T = \tilde{Q}\operatorname{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)\tilde{Q}^T,$$

ce qui implique

$$A = Q \operatorname{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N) Q^T$$

avec $Q = Q_1 \tilde{Q}$ orthogonale comme produit de deux matrices orthogonales (cf. proposition 3.7). Cela conclut la preuve de (i).

(iii) Par construction, les colonnes de Q forment une base de vecteurs propres de A. Le fait qu'elle soit orthonormée découle du fait que pour chaque sous-espace propre, c'est une famille orthonormée, et du fait que deux sous-espaces propres associés à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux (proposition 3.17). (ii) On sait que le déterminant est invariant par changement de base $(\det(PAP^{-1}) = \det(P) \det(A) \det(P^{-1}) = \det(A))$. Par conséquent,

$$\begin{split} \chi_A(\lambda) &= \det(\lambda \mathbf{I}_N - A) \\ &= \det\left(\lambda \mathbf{I}_N - Q \mathrm{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N) Q^{-1}\right) \\ &= \det\left(Q\left(\lambda \mathbf{I}_N - \mathrm{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)\right) Q^{-1}\right) \\ &= \det\left(\lambda \mathbf{I}_N - \mathrm{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)\right) \\ &= \det\left(\mathrm{Diag}(\lambda - \lambda_1, \dots, \lambda - \lambda_N)\right) \\ &= \prod_{j=1}^N (\lambda - \lambda_j). \end{split}$$

En particulier, χ_A est scindé sur \mathbb{R} (χ_A n'a pas de racines complexes).

Soit maintenant μ une valeur propre de A et $\operatorname{Ker}(A-\mu I_N)$ le sous-espace propre associé, dont la dimension sera notée d. On sait par le corollaire 1.32 qu'il existe une base orthonormée de $\operatorname{Ker}(A-\mu I_N)$ que l'on notera (Y_1,\ldots,Y_d) . On reprend alors le schéma de la preuve de (i) mais en considérant cette fois-ci (Y_1,\ldots,Y_d) au lieu de Y tout seul. On regarde donc $\operatorname{Vect}(Y_1,\ldots,Y_d)^{\perp}$, et on se donne (toujours par le corollaire 1.32) une base orthonormée (Z_1,\ldots,Z_{N-d}) de cet orthogonal. Comme précédemment, on vérifie que $(Y_1,\ldots,Y_d,Z_1,\ldots,Z_{N-d})$ est une base orthonormée de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, donc la matrice Q_1 dont les colonnes sont $Y_1,\ldots,Y_d,Z_1,\ldots,Z_{N-d}$ est orthogonale. De plus, on a cette fois

$$Q_1^{-1}AQ_1 = \begin{pmatrix} \mu \mathbf{I}_d & V \\ 0 & A' \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R}),$$

et on montre comme en (i) que $V=0\in\mathcal{M}_{d,N-d}(\mathbb{R})$ et que A' est symétrique. Le polynôme caractéristique de A s'écrit donc

$$\chi_A(\lambda) = \det(\lambda I_N - A) = \begin{vmatrix} (\lambda - \mu)I_d & 0\\ 0 & \lambda I_{N-d} - A' \end{vmatrix} = (\lambda - \mu)^d \chi_{A'}(\lambda).$$

D'après ce qu'on a vu, les racines de $\chi_{A'}$ sont réelles, mais il se pourrait a priori que μ soit aussi racine de $\chi_{A'}$. Nous cherchons justement à exclure ce cas. Si μ est racine de $\chi_{A'}$, alors μ est valeur propre de A', et il existe donc un vecteur propre associé $U' \in \mathcal{M}_{N-d,1}(\mathbb{R})$, que l'on peut supposer normé. Montrons alors que la famille

$$(Y_1,\ldots,Y_d,Q_1\begin{pmatrix}0\\U'\end{pmatrix})$$

est à la fois dans le sous-espace propre $\operatorname{Ker}(A - \mu I_N)$ et orthonormée. Si cela est vrai, on sait qu'une famille orthonormée est libre (proposition 1.22), donc cette famille doit avoir un cardinal $\leq \dim \operatorname{Ker}(A - \mu I_N) = d$, ce qui n'est pas le cas.

Il est clair que $Y_1 \dots, Y_d$ sont dans le sous-espace propre $\operatorname{Ker}(A - \mu I_N)$. On sait également que $A'U' = \mu U'$, donc

$$(Q_1^{-1}AQ_1)\begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu \mathbf{I}_{d_{\mu}} & 0 \\ 0 & A' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ A'U' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mu U' \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix},$$

ce qui dit bien que $Q_1\begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix}$ est dans le sous-espace propre $\operatorname{Ker}(A-\mu \mathbf{I}_N)$.

Reste à vérifier que cette famille est orthonormée. Les Y_j , $1 \le j \le d$ sont orthonormés, donc il suffit de vérifier que $Q_1 \begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix}$ est normé et orthogonal aux Y_j , $1 \le j \le d$. Tout d'abord, Q_1 étant orthogonale, on a

$$\left\| Q_1 \begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix} \right\| = \left\| \begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix} \right\| = \left\| U' \right\| = 1.$$

Ensuite, pour $1 \le j \le d$, on a, toujours puisque Q_1 est orthogonale et en notant $e_j = (\delta_{i,j})_{1 \le i \le N} \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$,

$$Y_j \cdot \left[Q_1 \begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix} \right] = \left[Q_1 e_j \right] \cdot \left[Q_1 \begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix} \right] = e_j \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ U' \end{pmatrix} = 0,$$

car le bloc de 0 est de taille $d \ge j$. On obtient ainsi une contradiction, ce qui assure que μ n'est pas racine de $\chi_{A'}$, et donc que $d = \dim \operatorname{Ker}(A - \mu I_N)$ est égal à la multiplicité de μ dans le polynôme caractéristique. Cela conclut la démonstration.

La méthode pour déterminer une base de vecteurs propres pour une matrice A (réelle et) symétrique (de taille 2 ou 3 pour nous) est alors la suivante :

- calculer le polynôme caractéristique $\chi_A(\lambda)$ en calculant le déterminant;
- déterminer les racines du polynôme caractéristique $\chi_A(\lambda)$, qui doivent être toutes réelles, et les multiplicités associées ;
- déterminer les sous-espaces propres et une base orthonormée de ces sous-espaces propres ;
- concaténer toutes ces bases orthonormées pour obtenir une base orthonormée formée de vecteurs propres de A.

Si l'on travaille avec un endomorphisme, on peut chercher sa matrice dans une base orthonormée (par exemple la base canonique), et appliquer la méthode précédente.

Exemple 3.21. On considère la matrice (réelle et) symétrique

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 & -2 \\ -2 & 1 & -2 \\ -2 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

On calcule le polynôme caractéristique $\chi_A(\lambda)$:

$$\chi_A(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda - 1 & 2 & 2 \\ 2 & \lambda - 1 & 2 \\ 2 & 2 & \lambda - 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda - 1 & 2 & 2 \\ 2 & \lambda - 1 & 2 \\ 0 & 3 - \lambda & \lambda - 3 \end{vmatrix}$$

en faisant $L_3 \leftarrow L_3 - L_2$. On peut alors factoriser $\lambda - 3$ de la dernière ligne, puis faire $C_2 \leftarrow C_2 + C_3$:

$$\chi_A(\lambda) = (\lambda - 3) \begin{vmatrix} \lambda - 1 & 2 & 2 \\ 2 & \lambda - 1 & 2 \\ 0 & -1 & 1 \end{vmatrix} = (\lambda - 3) \begin{vmatrix} \lambda - 1 & 4 & 2 \\ 2 & \lambda + 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = (\lambda - 3) \begin{vmatrix} \lambda - 1 & 4 \\ 2 & \lambda + 1 \end{vmatrix}$$
$$= (\lambda - 3) \Big((\lambda - 1)(\lambda + 1) - 8 \Big) = (\lambda - 3) \Big(\lambda^2 - 9 \Big) = (\lambda - 3)^2 (\lambda + 3).$$

On voit alors que A possède deux valeurs propres distinctes : -3, de multiplicité 1, et +3, de multiplicité 2.

On cherche ensuite les sous-espaces propres associés.

* Pour la valeur propre -3 (multiplicité 1), on a, pour $X = (x, y, z)^T \in \mathcal{M}_{3,1}(\mathbb{R})$,

$$X \in \operatorname{Ker}(A+3I_3) \Leftrightarrow \begin{cases} 4x - 2y - 2z &= 0 \\ -2x + 4y - 2z &= 0 \\ -2x - 2y + 4z &= 0 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} 4x - 2y - 2z &= 0 \\ -6x + 6y &= 0 \end{cases} \quad (\operatorname{avec} L_2 \leftarrow L_2 - L_1 \text{ et car } L_3 + L_2 + L_1 = 0)$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} z &= x \\ y &= x \end{cases} \Leftrightarrow X = x(1,1,1)^T \Leftrightarrow X \in \operatorname{Vect}\left((1,1,1)^T\right).$$

Ainsi,

$$Ker(A + 3I_3) = Vect((1, 1, 1)^T)$$

est bien de dimension 1 égale à la multiplicité.

* Pour la valeur propre 3 (multiplicité 2), on a, pour $X = (x, y, z)^T \in \mathcal{M}_{3,1}(\mathbb{R})$,

$$X \in \text{Ker}(A - 3I_3) \Leftrightarrow \begin{cases} -2x - 2y - 2z &= 0\\ -2x - 2y - 2z &= 0\\ -2x - 2y - 2z &= 0 \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow z = -x - y \Leftrightarrow X = x(1, 0, -1)^T + y(0, 1, -1)^T \Leftrightarrow X \in \text{Vect}\left((1, 0, -1)^T, (0, 1, -1)^T\right)$$

Ainsi,

$$Ker(A - 3I_3) = Vect((1, 0, -1)^T, (0, 1, -1)^T)$$

est bien de dimension 2 égale à la multiplicité.

On cherche ensuite des bases orthonormées de ces sous-espaces propres. Pour $\text{Ker}(A+3I_3) = \text{Vect}\left((1,1,1)^T\right)$, il suffit de prendre $\frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)^T$. Pour $\text{Ker}(A-3I_3) = \text{Vect}\left((1,0,-1)^T,(0,1,-1)^T\right)$, l'orthonormalisation de la famille $\left((1,0,-1)^T,(0,1,-1)^T\right)$ fournit la base orthonormée

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,-1)^T, \frac{1}{\sqrt{6}}(-1,2,-1)^T\right)$$

de $Ker(A - 3I_3)$. Par conséquent,

$$\left(\frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)^T, \frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,-1)^T, \frac{1}{\sqrt{6}}(-1,2,-1)^T\right)$$

est une base orthonormée de $\mathcal{M}_{3,1}(\mathbb{R})$ formée de vecteurs propres de A, ce qui se traduit par

$$A = Q \text{Diag}(-3, 3, 3) Q^T, \qquad \text{avec} \quad Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \text{ orthogonale.}$$

Proposition 3.22. (i) Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ une matrice (réelle et) symétrique. Si $\lambda \in \mathbb{R}$ est une valeur propre de A, alors

$$\inf\{(AX) \cdot X | X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) \ t.q. \ \|X\| = 1\} \leqslant \lambda \leqslant \sup\{(AX) \cdot X | X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) \ t.q. \ \|X\| = 1\}.$$

Autrement dit, le membre de gauche (resp. le membre de droite) est la plus petite (resp. la plus grande) valeur propre de A.

(ii) Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$ autoadjoint. Si $\lambda \in \mathbb{R}$ est une valeur propre de u, alors

$$\inf\{u(x)\cdot x|x\in\mathbb{R}^N\ t.q.\ \|x\|=1\}\leqslant\lambda\leqslant\sup\{u(x)\cdot x|x\in\mathbb{R}^N\ t.q.\ \|x\|=1\}.$$

Autrement dit, le membre de gauche (resp. le membre de droite) est la plus petite (resp. la plus grande) valeur propre de u.

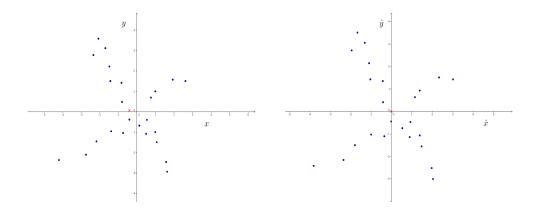


FIGURE 3.1 – Nuage de points (x_i, y_i) , $1 \le i \le N$ (à gauche). À droite, le nuage centré (\hat{x}_i, \hat{y}_i) , $1 \le i \le N$.

Preuve. On fait la preuve pour les matrices symétriques, car le cas autoadjoint est analogue. Si $\lambda \in \mathbb{R}$ est une valeur propre de A, alors il existe un vecteur propre $Y \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ associé, que l'on peut toujours supposer normé. Alors

$$\inf\{(AX)\cdot X|X\in\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) \text{ t.q. } ||X||=1\}\leqslant (AY)\cdot Y=(\lambda Y)\cdot Y=\lambda ||Y||^2=\lambda,$$

et on a, par un calcul analogue,

$$\lambda \leq \sup\{(AX) \cdot X | X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) \text{ t.q. } ||X|| = 1\}.$$

De plus, on a vu (théorème 3.18) que le membre de gauche et le membre de droite sont effectivement des valeurs propres de A.

Cette proposition amène tout naturellement à la définition suivante.

Définition 3.23. (i) Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ une matrice (réelle et) symétrique. On dit que A est positive si toutes ses valeurs propres sont positives, ce qui revient à dire que $(AX) \cdot X \geqslant 0$ quel que soit $X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ normé. On dit que A est définie positive si toutes ses valeurs propres sont strictement positives, ce qui revient à dire que $(AX) \cdot X > 0$ quel que soit $X \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ normé.

(ii) Soit $u \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^N)$ un endomorphisme autoadjoint. On dit que u est positif si toutes ses valeurs propres sont positives, ce qui revient à dire que $(u(x)) \cdot x \ge 0$ quel que soit $x \in \mathbb{R}^N$ normé. On dit que u est définie positif si toutes ses valeurs propres sont strictement positives, ce qui revient à dire que $(u(x)) \cdot x > 0$ quel que soit $x \in \mathbb{R}^N$ normé.

3.3 Analyse en composantes principales (ACP)

On envisage la situation suivante. On est dans le plan \mathbb{R}^2 et on dispose de $N\geqslant 2$ points (x_i,y_i) , $1\leqslant i\leqslant N$ comme dans la figure 3.1 à gauche (avec N=24). On commence par centrer les variables en regardant $\hat{x}_j=x_j-\bar{x}$ et $\hat{y}_j=y_j-\bar{y},\ 1\leqslant j\leqslant N$. Pour notre exemple, $\bar{x}\approx -0.3941(6)$ et $\bar{y}=0.065$. Cela nous donne les points de la figure 3.1 à droite. Pour $U=(u,v)\in\mathbb{R}^2$ normé, on cherche à minimiser

$$G(U) = \sum_{j=1}^{N} \operatorname{dist}^{2}((\hat{x}_{j}, \hat{y}_{j}), \operatorname{Vect}(U)).$$

On a vu au chapitre 2 (théorème 1.46) que, pour tout $1 \leq j \leq N$,

$$\operatorname{dist}^{2}((\hat{x}_{j}, \hat{y}_{j}), \operatorname{Vect}(U)) = \|(\hat{x}_{j}, \hat{y}_{j})\|^{2} - \operatorname{dist}^{2}((\hat{x}_{j}, \hat{y}_{j}), \operatorname{Vect}(U)^{\perp}) = \|(\hat{x}_{j}, \hat{y}_{j})\|^{2} - ((\hat{x}_{j}, \hat{y}_{j}) \cdot U)^{2}$$

car U est normé. Ainsi,

$$G(U) = \sum_{j=1}^{N} \|(\hat{x}_j, \hat{y}_j)\|^2 - \sum_{j=1}^{N} ((\hat{x}_j, \hat{y}_j) \cdot U)^2,$$

et minimiser G revient donc à maximiser $\sum_{j=1}^{N} ((\hat{x}_j, \hat{y}_j) \cdot U)^2$. En écrivant U = (u, v) et en explicitant le produit scalaire, on trouve, puisque les \hat{x}_j et les \hat{y}_j sont de moyenne nulle,

$$\sum_{j=1}^{N} ((\hat{x}_j, \hat{y}_j) \cdot U)^2 = \sum_{j=1}^{N} (u\hat{x}_j + v\hat{y}_j)^2 = N \operatorname{Var}(u\hat{x} + v\hat{y}),$$

de sorte que minimiser G revient à maximiser la variance du vecteur $u\hat{x} + v\hat{y}$, avec la contrainte $||U||^2 = u^2 + v^2 = 1$. On peut également développer le carré et obtenir

$$\sum_{j=1}^{N} \left((\hat{x}_j, \hat{y}_j) \cdot U \right)^2 = \sum_{j=1}^{N} \left(u^2 \hat{x}_j^2 + v^2 \hat{y}_j^2 + 2uv \hat{x}_j \hat{y}_j \right) = N \left(u^2 \operatorname{Var}(x) + v^2 \operatorname{Var}(y) + 2uv \operatorname{Covar}(x, y) \right),$$

ce qui se ré-écrit sous la forme

$$N\left(\begin{pmatrix} \operatorname{Var}(x) & \operatorname{Covar}(x,y) \\ \operatorname{Covar}(x,y) & \operatorname{Var}(y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}.\right)$$

Nous avons vu dans le théorème 3.18 que maximiser cette expression avec ||U|| = 1 est en lien direct avec la plus grande valeur propre de la matrice réelle symétrique

$$\begin{pmatrix} \operatorname{Var}(x) & \operatorname{Covar}(x,y) \\ \operatorname{Covar}(x,y) & \operatorname{Var}(y) \end{pmatrix}$$

que l'on va appeler la matrice de covariance de (x,y) (ou de (\hat{x},\hat{y})). Attardons-nous un peu sur ce type de matrice.

Définition 3.24. [Matrice de covariance] Soit $r \in \mathbb{N}^*$ et $N \in \mathbb{N}^*$ donnés. Pour une famille de N vecteurs $X_j = (X_{1,j}, \ldots, X_{r,j}), \ 1 \leq j \leq N$ dans $\mathcal{M}_{r,1}(\mathbb{R})$, on définit la matrice de covariance

$$K(X_1, \dots, X_N) = \left(\operatorname{Covar} \left((X_{k,:}, X_{\ell,:}) \right)_{1 \leq k, \ell \leq r} \in \mathcal{M}_r(\mathbb{R}), \right)$$

où l'on rappelle que la covariance de deux vecteurs $x, y \in \mathbb{R}^N$ vaut

$$Covar(x,y) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} (x_j - \bar{x})(y_j - \bar{y}) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} x_j y_j - \bar{x}\bar{y}.$$

Théorème 3.25. [Une matrice de covariance est positive] Soit $r \in \mathbb{N}^*$ et $N \in \mathbb{N}^*$ donnés, ainsi qu'une famille de N vecteurs colonne $X_j = (X_{1,j}, \ldots, X_{r,j}), 1 \leq j \leq N$, dans $\mathcal{M}_{r,1}(\mathbb{R})$. La matrice de covariance $K(X_1, \ldots, X_N)$ est une matrice carrée de taille r réelle symétrique et positive (c'est-à-dire que ses valeurs propres sont positives).

Preuve. Il est clair, de par sa définition, que $K(X_1, \ldots, X_N)$ est une matrice réelle et symétrique de taille r. On peut toujours remplacer les $X_j = (X_{1,j}, \ldots, X_{r,j})$ par $(X_{1,j} - \overline{X_{1,:}}, \ldots, X_{r,j} - \overline{X_{r,:}})$, et on supposera donc dans la suite que $\overline{X_{k,:}} = 0$ quel que soit $1 \leq k \leq r$.

Soit ensuite $U = (U_1, \dots, U_r)^T \in \mathcal{M}_{r,1}(\mathbb{R})$ normé. On forme

$$(K(X_{1},...,X_{N})U) \cdot U = \sum_{i=1}^{r} (K(X_{1},...,X_{N})U)_{i}U_{i} = \sum_{i=1}^{r} (\sum_{j=1}^{r} Covar(X_{i,:},X_{j,:})U_{j})U_{i}$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{r} (X_{i,:} \cdot X_{j,:})U_{j}U_{i} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{r} (U_{i}X_{i,:}) \cdot (U_{j}X_{j,:})$$

$$= \frac{1}{N} (\sum_{i=1}^{r} U_{i}X_{i,:}) \cdot (\sum_{j=1}^{r} U_{j}X_{j,:}) = \frac{1}{N} \left\| \sum_{i=1}^{r} U_{i}X_{i,:} \right\|^{2} \geqslant 0.$$

On aura noté que c'est le même calcul que celui fait au début de la section 1.6. En effet, pour les vecteurs centrés, on a, avec $X = (X_{i,j})_{1 \leq i \leq r, 1 \leq j \leq N} \in \mathcal{M}_{r,N}(\mathbb{R}),$

$$K(X_1,\ldots,X_N)=\frac{1}{N}XX^T.$$

Des calculs précédents, immédiatement généralisables en dimension $r \ge 2$ quelconque, on déduit le résultat suivant.

Proposition 3.26. Soit $r \in \mathbb{N}^*$ et $N \in \mathbb{N}^*$ donnés, ainsi qu'une famille de r vecteurs colonne X_i $(X_{1,j},\ldots,X_{r,j}),\ 1\leqslant j\leqslant N,\ dans\ \mathcal{M}_{r,1}(\mathbb{R}).\ Pour\ U_*\in\mathbb{R}^r\ norm\acute{e},\ il\ y\ a\ \acute{e}quivalence\ entre$ (i) U_* minimise

$$G(U) = \sum_{i=1}^{N} dist^{2} ((\hat{x}_{j}, \hat{y}_{j}), \text{Vect}(U))$$

- avec la contrainte $\|U\|^2 = \sum_{j=1}^r U_j^2 = 1$; (ii) U_* maximise $\operatorname{Var}\left(\sum_{j=1}^r U_j X_{j,:}\right)$, avec la contrainte $\|U\|^2 = \sum_{j=1}^r U_j^2 = 1$; (iii) U_* maximise $\left(K(X_1,\ldots,X_N)U\right) \cdot U$ avec la contrainte $\|U\|^2 = \sum_{j=1}^r U_j^2 = 1$; (iv) U_* est un vecteur propre de la matrice de covariance $K(X_1,\ldots,X_N)$ réelle et symétrique associé à la plus grande valeur propre.

Par le théorème spectral matriciel (théorème 3.20), on sait que la matrice de covariance $K(X_1, \ldots, X_N)$ est diagonalisable en base orthonormée. On peut alors définir la notion de composante principale.

Définition 3.27. [Analyse en Composantes Principales (PCA en anglais)] Soit $r \in \mathbb{N}^*$ et $N \in \mathbb{N}^*$ donnés. Les composantes principales du nuage de points donné par les r vecteurs colonne $X_i = (X_{1,j}, \ldots, X_{r,j}),$ $1 \leqslant j \leqslant N$, dans $\mathcal{M}_{r,1}(\mathbb{R})$, sont les vecteurs d'une base orthonormée de vecteurs propres de la matrice de covariance

$$K(X_1,\ldots,X_N) = \left(\operatorname{Covar}(X_{k,:},X_{\ell,:})\right)_{1\leqslant k,\ell\leqslant r} \in \mathcal{M}_r(\mathbb{R}),$$

rangés de sorte que l'on mette les valeurs propres dans l'ordre décroissant (elles sont positives).

Si Q désigne la matrice carrée de taille r contenant cette base orthonormée de vecteurs propres, alors on

$$K(X_1,\ldots,X_N) = QDiag(\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_r)Q^{-1},$$

avec $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_r \geqslant 0$.

Pour le nuage envisagé dans la figure 3.1, où r=2, on trouve la matrice de covariance

$$K(x,y) = \begin{pmatrix} 2.792(9) & -0.3892(5) \\ -0.3892(5) & 3.321(4) \end{pmatrix}.$$

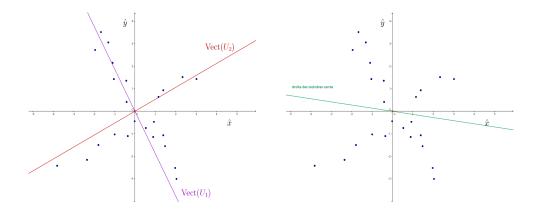


FIGURE 3.2 – Nuage de points centré (\hat{x}_i, \hat{y}_i) , $1 \le i \le N$, (à gauche) et les deux droites portées par les composantes principales. À droite, le nuage de points centré (\hat{x}_i, \hat{y}_i) , $1 \le i \le N$, avec la droite d'approximation au sens des moindres carrés (en vert).

Le calcul des valeurs propres dans l'ordre décroissant donne

$$\lambda_1 \approx 3.527(6) > \lambda_2 \approx 2.586(7),$$

et les vecteurs propres associés

$$U_1 \approx \begin{pmatrix} 0.4681(5) \\ -0.8836(4) \end{pmatrix}$$
 $U_2 \approx \begin{pmatrix} 0.8836(4) \\ 0.4681(5) \end{pmatrix}$.

On peut dessiner sur le nuage (centré) ces deux droites (perpendiculaires) : voir figure 3.2 (gauche).

On pourrait également regarder ce que donne l'approximation par la droite des moindres carrés. Pour les variables centrées (\hat{x}, \hat{y}) , on sait (théorème 2.6) que la pente $\alpha_{1,*}$ est donnée par

$$\alpha_{1,*} = \frac{\text{Covar}(x,y)}{\text{Var}(x)} = \frac{K_{1,2}}{K_{1,1}} \approx -0.1393(7).$$

La droite des moindres carrés (centrée) est la droite en vert sur la figure 3.2 à droite. Le coefficient de détermination linéaire vaut alors (sur cet exemple)

$$R^2 = \frac{\text{Covar}^2(x, y)}{\text{Var}(x) \text{Var}(y)} = \frac{K_{1,2}^2}{K_{1,1}K_{2,2}} \approx 0.0163(3).$$

Le fait qu'ici R^2 soit vraiment très petit est en accord avec le fait que la droite verte est une très mauvaise approximation du nuage de points.

Les composantes principales de ce nuage sont donc un système de coordonnées orthonormées dans lequel la variance de la projection sur la première coordonnée est maximale, puis, parmi les directions orthogonales à la première, la variance de la projection est maximale pour la seconde direction, etc. Dans ce nouveau système de coordonnées, il y a une hiérarchie. Afin de visualiser l'importance relative de chacune de ces nouvelles coordonnées, on trace un diagramme éboulis (scree plot en anglais), ce qui peut permettre de voir quelles sont les coordonnées qui contiennent le plus d'information. Sur le diagramme éboulis (scree plot) de la figure 3.3 où r=6, on peut considérer que les deux premières valeurs propres sont significatives et que les valeurs propres 4, 5 et 6 ne le sont pas, et selon ce que l'on souhaite faire, on peut décider ou non de garder la troisième valeur propre.

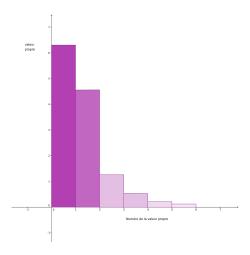


FIGURE 3.3 – Diagramme éboulis (scree plot en anglais) du nuage de points (centré $(\hat{x}_i, \hat{y}_i), 1 \le i \le N$).

On considère le nuage de points donné par

$$\hat{X}_i' = Q^{-1}\hat{X}_j = Q^T\hat{X}_j \in \mathcal{M}_{r,1}(\mathbb{R}), \qquad 1 \leqslant j \leqslant N,$$

c'est-à-dire le nuage de points (centré) mais dans les nouvelles variables. Pour les points de notre nuage, cela donne la figure 3.4 où les axes $Vect(U_1)$, $Vect(U_2)$ sont devenus les axes de coordonnées, notés CP_1 et CP_2 (pour Composante Principale).

Supposons que la dimension N soit grande. La visualisation du nuage (dans \mathbb{R}^N) n'est pas pas très facile. L'Analyse en Composante Principale peut alors permettre une visualisation approchée du nuage. Supposons par exemple que l'on ne garde qu'une seule valeur propre, considérée comme seule significative. Alors, on peut se contenter de représenter uniquement la première coordonnée des r points du nuage : voir la figure 3.4 à droite. Plus généralement, pour $1 \leq \ell < N$, on peut se contenter de représenter uniquement les ℓ premières coordonnées des r points du nuage. Cela revient à représenter le nuage de points

$$\hat{X}'_{1:\ell,j} \in \mathcal{M}_{\ell,1}(\mathbb{R}), \qquad 1 \leqslant j \leqslant N.$$

Si $\ell=1, 2$ ou 3, la visualisation est facile, et peut permettre d'identifier par exemple des agglomérats (ou groupements) de points. Sur la figure 3.5 (prise sur Wikipédia), on a représenté les deux premières composantes de l'ACP d'un nuage de 354 points (individus). Pour chaque individu, on a regardé 37 marqueurs génétiques. On a donc un nuage initial de r=354 points dans \mathbb{R}^{37} . La représentation des deux premières composantes de l'ACP permet de voir des groupements qui correspondent à différentes lignées d'individus (en couleurs).

Puisque Q est orthogonale, notons que

$$\sum_{j=1}^{N} \|\hat{X}_{j}'\|^{2} = \sum_{j=1}^{N} \|Q^{-1}\hat{X}_{j}\|^{2} = \sum_{j=1}^{N} \|\hat{X}_{j}\|^{2},$$

et cette quantité s'appelle la variation totale du nuage de points. En particulier, on peut se fixer comme critère de choix pour déterminer ℓ d'avoir, par exemple,

$$\sum_{j=1}^{N} \|\hat{X}'_{1:\ell,j}\|^2 \geqslant \frac{95}{100} \sum_{j=1}^{N} \|\hat{X}_j\|^2,$$

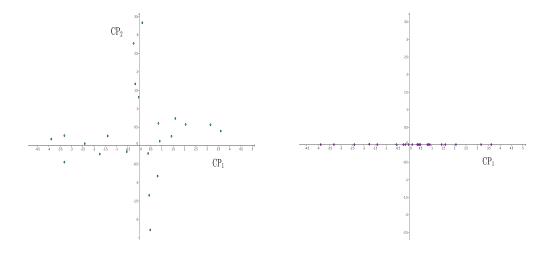


FIGURE 3.4 – Représentation du nuage de points (centré) dans les variables données par les composantes principales (à gauche). À droite, représentation de la première coordonnée du nuage.

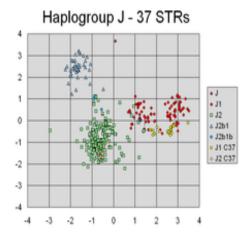


FIGURE 3.5 – Représentation des deux premières composantes de l'ACP du nuage de points des 37 marqueurs génétiques des 354 individus (Wikipédia).

de façon à ne négliger "que" 5% de la variation totale $\sum_{j=1}^{N} \|\hat{X}_j\|^2$. Remarquons alors que la relation matricielle (où $\hat{X} = (\hat{X}_{i,j})_{\substack{1 \leqslant i \leqslant r \\ 1 \leqslant i \leqslant N}}$

$$K(\hat{X}_1, \dots, \hat{X}_N) = \frac{1}{N} \hat{X} \hat{X}^T = Q \text{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r) Q^T$$

donne, en prenant la trace,

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{r} \left(\hat{X}\hat{X}^{T}\right)_{i,i} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{r} \|\hat{X}_{i,:}\|^{2} = \operatorname{Tr}\left(Q\operatorname{Diag}(\lambda_{1},\ldots,\lambda_{r})Q^{T}\right) = \operatorname{Tr}\left(\operatorname{Diag}(\lambda_{1},\ldots,\lambda_{r})\right) = \sum_{i=1}^{r} \lambda_{i}.$$

Puisque

$$\frac{1}{N}Q^{-1}\hat{X}\hat{X}^TQ = \frac{1}{N}\hat{X}'(\hat{X}')^T = \text{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r),$$

un calcul similaire donne

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \|\hat{X}'_{1:\ell,j}\|^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \sum_{i=1}^{\ell} (\hat{X}'_{i,j})^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=1}^{N} (\hat{X}'_{i,j})^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{\ell} \|\hat{X}'_{i,:}\|^2 = \sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i.$$

Ainsi, la condition

$$\sum_{j=1}^{\ell} \|\hat{X}_j'\|^2 \geqslant \frac{95}{100} \sum_{j=1}^{r} \|\hat{X}_j\|^2$$

peut se ré-écrire en terme de valeurs propres de K comme

$$\frac{\sum_{i=1}^{\ell} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{r} \lambda_i} \geqslant \frac{95}{100}.$$

Dans un autre contexte, en finance, on peut construire un nuage de points de la façon suivante. Pour un jeu de N observations du marché, correspondant à certaines dates, on peut, pour chaque observation j, noter les taux de change pour diverses durées de prêt : 1 an, 2 ans, 3 ans, 4 ans, 5 ans, 7 ans, 10 ans et 13 ans. On forme ainsi un nuage de N points dans \mathbb{R}^8 . Les trois premières composantes sont souvent utilisées pour analyser le marché et faire des prédictions. Elles sont parfois appelées parallel shift (décalage), twist (torsion) et curvature (courbure) : voir, par exemple [7] §9.7.

Enfin, on peut utiliser l'ACP en compression d'images. Une image peut se voir comme un nuage de n^2 points dans \mathbb{R}^3 en codant une couleur par RGB (Red, Green, Blue). On peut alors faire l'ACP de ce nuage de points, et ne retenir que les ℓ premières composantes (par exemple, pour ne garder que 95%, au moins, de la variation totale). On dispose alors d'une image approchée (centrée) donnée par

$$\hat{X}_{j}^{\text{app}} = \sum_{i=1}^{\ell} \hat{X}_{i,j}' Q_{:,i}, \qquad 1 \leqslant j \leqslant N.$$

Si $\ell = r$, alors $X_j^{\text{app}} = X_j$ pour $1 \leq j \leq N$. La question est alors de trouver ℓ à la fois le plus petit possible et tel que l'image approchée soit une approximation suffisante de l'image d'origine.

Parfois, il peut arriver que le nuage soit déjà très étiré dans une direction. Cette direction est alors automatiquement privilégiée dans l'ACP. Une façon de remédier à ce problème est de ne pas chercher les valeurs propres et vecteurs propres de la matrice de covariance $K(X_1, \ldots, X_r)$ mais plutôt de $K(Y_1, \ldots, Y_r)$, où

$$Y_j = \frac{X_j - \overline{X_{:,j}}}{\sqrt{\operatorname{Var}(X_{:,j})}},$$

de sorte que toutes les variables sont "centrées et réduites", c'est-à-dire de moyenne (ou espérance) nulle et de variance égale à 1. Dans le même esprit, on peut introduire des poids positifs ω_j , $1 \leq j \leq N$, dont la somme vaut 1 et considérer les valeurs propres de la matrice (réelle et) symétrique

$$\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^N \omega_j \hat{X}_{k,j} \hat{X}_{\ell,j}\right)_{1 \leqslant k,\ell \leqslant r} \in \mathcal{M}_r(\mathbb{R}).$$

Nous pouvons lister quelques avantages et inconvénients de l'ACP. Du côté des avantages, on trouve : la possibilité de réduire la dimension des données en sélectionnant les coordonnées les plus significatives ; la possibilité de visualiser les données dans le plan ou l'espace, afin d'identifier des groupements, des structures ; la possibilité d'extraire l'information importante d'une image (ou d'un signal sonore) ; la possibilité d'analyser les sources importantes de variation dans un processus industriel afin d'améliorer la qualité. L'ACP présente malgré tout des désavantages : l'interprétabilité des variables CP_1 , CP_2 etc., n'est pas forcément évidente car elles sont des combinaisons linéaires des coordonnées d'origine ; l'ACP repose sur l'hypothèse de relations linéaires entre des variables, alors qu'il peut y avoir des phénomènes non linéaires ; l'ACP est sensible aux points très éloignés du cœur du nuage, et il peut être nécessaire de faire un premier traitement pour déterminer s'il faut ou non garder ces points très particuliers.

3.4 Décomposition QR d'une matrice

Pour $A \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R})$, on notera, pour $1 \leq i \leq N$ et $1 \leq j \leq p$ $A_{i,:} \in \mathbb{R}^p = \mathcal{M}_{1,p}(\mathbb{R})$ la *i*-ième ligne de A et $A_{:,j} \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ la *j*-ième colonne de A.

Théorème 3.28. [Décomposition QR d'une matrice carrée] Soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$.

- (i) Il existe $Q \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ orthogonale et $R \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ triangulaire supérieure à coefficients diagonaux positifs vérifiant A = QR.
- (ii) Si A est inversible, alors le couple (Q,R) est unique et les colonnes de Q sont les vecteurs obtenus par l'orthonormalisation de Gram-Schmidt des colonnes de A (dans l'ordre naturel).

Preuve. (ii) On considère la première colonne dans A = QR, ce qui donne $A_{:,1} = R_{1,1}Q_{:,1}$, puisque R est supposée triangulaire supérieure. Comme Q est orthogonale, $Q_{:,1}$ est normé et vu que les coefficients diagonaux de R sont positifs, il vient $R_{1,1} = ||A_{:,1}||$. De plus, $||A_{:,1}|| > 0$ sinon A ne serait pas inversible. Par conséquent, $Q_{:,1} = \frac{A_{:,1}}{||A_{:,1}||}$. Il y a donc bien unicité de $R_{1,1}$ et de $Q_{:,1}$, qui est bien le premier vecteur obtenu par l'orthonormalisation de Gram-Schmidt des colonnes de A.

On considère la deuxième colonne dans A = QR, ce qui donne, vu que R est triangulaire supérieure,

$$A_{:,2} = R_{2,2}Q_{:,2} + R_{1,2}Q_{:,1}.$$

En prenant le produit scalaire avec $Q_{:,1}$ (Q est orthogonale), on obtient

$$A_{:,2} \cdot Q_{:,1} = R_{1,2}$$

d'où l'unicité pour $R_{1,2}$. On déduit alors

$$A_{:,2} - R_{1,2}Q_{:,1} = A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1} = R_{2,2}Q_{:,2},$$

et ce vecteur n'est pas nul (sinon, les deux premières colonnes de A seraient colinéaires). Comme $R_{2,2} \ge 0$, on doit avoir

$$R_{2,2} = \|A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1}\| \qquad Q_{:,2} = \frac{A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1}}{\|A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1}\|}$$

d'où l'unicité pour $R_{2,2}$ et de $Q_{:,2}$, qui est bien le deuxième vecteur obtenu par l'orthonormalisation de Gram-Schmidt des colonnes de A.

Lorsque l'on considère la troisième colonne, on trouvera de même $A_{:,3} = R_{3,3}Q_{:,3} + R_{1,3}Q_{:,1} + R_{2,3}Q_{:,2}$, puis $R_{1,3} = A_{:,3} \cdot Q_{:,1}$, $R_{2,3} = A_{:,3} \cdot Q_{:,2}$, et enfin

$$R_{3,3} = \|A_{:,3} - (A_{:,3} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1} - (A_{:,3} \cdot Q_{:,2})Q_{:,2}\| \qquad Q_{:,3} = \frac{A_{:,3} - (A_{:,3} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1} - (A_{:,3} \cdot Q_{:,2})Q_{:,2}}{\|A_{:,3} - (A_{:,3} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1} - (A_{:,3} \cdot Q_{:,2})Q_{:,2}\|}.$$

On obtient ainsi l'unicité de Q et de

$$R = \begin{pmatrix} \|A_{:,1}\| & A_{:,2} \cdot Q_{:,1} & A_{:,3} \cdot Q_{:,1} & A_{:,4} \cdot Q_{:,1} & \cdots \\ 0 & \|A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1}\| & A_{:,3} \cdot Q_{:,2} & A_{:,4} \cdot Q_{:,2} & \cdots \\ 0 & 0 & \|A_{:,3} - (A_{:,3} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1} - (A_{:,3} \cdot Q_{:,2})Q_{:,2}\| & A_{:,4} \cdot Q_{:,3} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

(i) Pour la partie existence (sans supposer a priori la matrice A inversible), il suffit d'appliquer la méthode de Gram-Schmidt avec la règle suivante : si $A_{:,1} \neq 0$, alors on prend $b_1 = Q_{:,1} = \frac{A_{:,1}}{\|A_{:,1}\|}$, et si $A_{:,1} = 0$, alors on choisit $b_1 = Q_{:,1} \in \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$ unitaire quelconque. Puis, si $A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1} \neq 0$, on prend $Q_{:,2} = b_2 = \frac{A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1}}{\|A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1}\|}$, et si $A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1} = 0$, alors on choisit $b_2 = Q_{:,2}$ orthogonal à $b_1 = Q_{:,1}$ (cela existe) et normé, etc. Ainsi, on a, dans tous les cas, $A_{:,1} = \|A_{:,1}\|Q_{:,1}$, $A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1} = \|A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1}\|Q_{:,2}$, etc., ce qui se traduit par l'égalité matricielle A = QR.

Comme on le voit, lorsque A n'est pas inversible, il n'y a plus unicité du couple (Q, R). En effet, si $A_{:,1} = 0$ (resp. $A_{:,2} - (A_{:,2} \cdot Q_{:,1})Q_{:,1} = 0$), alors le choix de $Q_{:,1}$ (resp. de $Q_{:,2}$) est arbitraire. Ces différents choix de Q donnent a priori des matrices R différentes.

Exemple 3.29. On considère la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Étant donnés les calculs de l'exercice 10, on a trouvé une base orthonormée de $\mathcal{M}_{3,1}(\mathbb{R})$ en appliquant l'algorithme de Gram-Schmidt :

$$b_1 = \frac{(1,0,1)^T}{\|(1,0,1)^T\|} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\0\\1 \end{pmatrix}, \qquad b_2 = \frac{(0,1,0)^T}{\|(0,1,0)^T\|} = \begin{pmatrix} 0\\1\\0 \end{pmatrix}, \qquad b_3 = \frac{(-1/2,0,1/2)^T}{\|(-1/2,0,1/2)^T\|} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1\\0\\1 \end{pmatrix}.$$

La décomposition QR de la matrice A s'écrit alors

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} = QR = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

avec Q matrice orthogonale et R triangulaire supérieure.

La décomposition QR intervient dans diverses méthodes algorithmiques :

- la méthode QR de recherche des valeurs propres et vecteurs propres d'une matrice (voir, par exemple, [13], section 13.5 (p. 327), [16], section 6.6.4 p. 415 ou [8], Tome 2, section 11.5 (p. 591));
- la résolution de problèmes aux moindres carrés surdéterminés : au lieu de résoudre le système d'équations normales $A^TAx = A^Tb$ en formant la matrice A^TA , ce qui peut s'avérer une très mauvaise idée si l'on fait les calculs numériquement sur un ordinateur, on peut commencer par faire une décomposition QR de A, ce qui transforme le système d'équations normales en

$$(QR)^T(QR)x = R^TQ^TQRx = R^TRx = A^Tb,$$

ce qui ne demande plus que la résolution de deux systèmes triangulaires. Voir, par exemple, [16], section 4.8.2 p. 235.

Pour le calcul numérique sur ordinateur, l'algorithme de Gram-Schmidt comme vu à la section 1.3 donne des résultats qui peuvent être désastreux.

3.5 Décomposition en valeurs singulières (DVS)

La décomposition matricielle qui suit ressemble dans sa formulation au théorème spectral (pour les matrices). Elle s'applique aux matrices non symétriques, et même aux matrices non carrées. Le point essentiel est qu'il ne s'agit plus d'un changement de base.

Théorème 3.30. [Décomposition en valeurs singulières d'une matrice réelle] Soit $p \in \mathbb{N}^*$ et $N \in \mathbb{N}^*$ donnés, ainsi que $A \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R})$.

(i) Il existe $U \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ orthogonale de taille $N, V \in \mathcal{M}_p(\mathbb{R})$ orthogonale de taille p et $\Sigma \in \mathcal{M}_{N,p}(\mathbb{R})$ diagonale (au sens où $\Sigma_{i,j} = 0$ si $i \neq j$) avec les coefficients "diagonaux" $\Sigma_{i,i}$, $1 \leq i \leq \min(N,p)$, positifs telles que

$$A = U\Sigma V^T$$
.

(ii) Les matrices U et V ne sont pas uniques. La famille des coefficients "diagonaux" $\Sigma_{i,i}$, $1 \le i \le \min(N,p)$, est unique (à l'ordre près, donc) : il y a autant de coefficients "diagonaux" $\Sigma_{i,i}$, $1 \le i \le \min(N,p)$, strictement positifs que le rang de A, et ces coefficients "diagonaux" $\Sigma_{i,i}$ strictement positifs sont exactement les racines carrées des valeurs propres non nulles à la fois de A^TA et de AA^T .

Preuve dans le cas carré (N=p). On suppose ici N=p pour simplifier. Le cas général est très semblable. (i) Vu le (ii), on forme la matrice A^TA , qui est réelle, symétrique, et à valeurs propres positives (voir les calculs effectués lors de la preuve du théorème 3.25). Le théorème spectral (théorème 3.20) pour les matrices réelles symétriques assure alors de l'existence de $\lambda_1 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_N$ réels positifs (car les valeurs propres de A^TA sont positives) et de $V \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ orthogonale tels que $A^TA = V \operatorname{Diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_N) V^T$. Dans la liste des valeurs propres, certaines peuvent être nulles : on note s entier tel que $\lambda_1 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_s > 0 = \lambda_{s+1} = \ldots = \lambda_N$. On note (e_1, \ldots, e_N) la base canonique de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$. Vérifons que les vecteurs $\frac{1}{\sqrt{\lambda_j}}AVe_j$, $1 \leqslant j \leqslant s$, forment une famille orthonormée dans $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$. Pour $1 \leqslant j, k \leqslant s$, on a

$$\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_j}}AVe_j\right)\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_k}}AVe_k\right) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_j\lambda_k}}(AVe_j)\cdot(AVe_k) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_j\lambda_k}}(A^TAVe_j)\cdot(Ve_k),$$

par la formule vue à la section 1.6. Or, $A^T A = V \text{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N) V^T$, donc

$$(A^T A V e_j) \cdot (V e_k) = (\text{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N) e_j) \cdot e_k = \lambda_j \delta_{j,k}.$$

On a donc bien

$$\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_j}}AVe_j\right)\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_k}}AVe_k\right) = \frac{\lambda_j\delta_{j,k}}{\sqrt{\lambda_j\lambda_k}} = \delta_{j,k}.$$

Le même calcul montre également que, pour $s < j \leq N$, on a

$$||AVe_j||^2 = (AVe_j) \cdot (AVe_j) = (A^T AVe_j) \cdot (Ve_j) = \lambda_j = 0,$$

c'est-à-dire $AVe_j = 0$.

On considère alors une base orthonormée (Z_1, \ldots, Z_{N-s}) de Vect $(\lambda_j^{-1/2} AV e_j, 1 \leq j \leq s)^{\perp}$, et on définit ensuite $U \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ dont les colonnes sont

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda_1}}AVe_1, \frac{1}{\sqrt{\lambda_2}}AVe_2, \dots, \frac{1}{\sqrt{\lambda_s}}AVe_s, Z_1, \dots, Z_{N-s}.$$

Ces colonnes formant une base orthonormée de $\mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R})$, U est une matrice orthogonale. On définit enfin $\Sigma \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ comme étant la matrice diagonale dont les coefficients diagonaux sont $\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \ldots, \sqrt{\lambda_s}, 0 = \sqrt{\lambda_{s+1}} = \ldots \sqrt{\lambda_N}$. On a alors, pour $1 \leqslant j \leqslant s$,

$$AVe_j = \sqrt{\lambda_j} Ue_j = U\Sigma e_j,$$

et si $s < j \leq N$, alors

$$AVe_i = 0 = U\Sigma e_i$$
.

En conclusion, on a $AV = U\Sigma$ (les colonnes de ces deux matrices sont identiques), ce qui implique $A = U\Sigma V^T$, comme voulu.

(ii) Les matrices U et V ne sont pas uniques. On peut changer de signe un vecteur colonne de U ainsi que la colonne de V correspondante. Dans le choix d'une base orthonormée de $\operatorname{Vect}(AVe_1,\ldots,AVe_s)^{\perp}$, il n'y a pas non plus d'unicité en général.

Si l'on dispose d'une telle décomposition $A = U\Sigma V^T$, alors on obtient $A^TA = V\Sigma^T\Sigma V^T$. En outre, si $N \leq p$, alors

$$\Sigma^{T} \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{1,1} & (0) \\ & \ddots & \\ & & \Sigma_{N,N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Sigma_{1,1} & & \\ & \ddots & \\ (0) & & \Sigma_{N,N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_{1,1}^{2} & (0) & \\ & \ddots & \\ (0) & & \Sigma_{N,N}^{2} & \\ & & & & & \\ \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_{p}(\mathbb{R}),$$

et cela fait apparaître $\Sigma_{1,1}, \ldots, \Sigma_{N,N}, 0, \ldots, 0$ comme les racines carrées (les $\Sigma_{i,i}$ sont positifs par hypothèse) des valeurs propres de A^TA . D'où leur unicité (à l'ordre près). D'autre part, si $N \ge p$, alors

$$\Sigma^{T} \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{1,1} & & & & \\ & \ddots & & & \\ (0) & & \Sigma_{p,p} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Sigma_{1,1} & & & (0) \\ & \ddots & & \\ & & \Sigma_{p,p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_{1,1}^{2} & & & (0) \\ & \ddots & & \\ & & \Sigma_{p,p} \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_{p}(\mathbb{R}),$$

et cela fait apparaître $\Sigma_{1,1}, \ldots, \Sigma_{p,p}$ comme les racines carrées (les $\Sigma_{i,i}$ sont positifs) des valeurs propres de A^TA . D'où leur unicité (à l'ordre près). Un calcul tout à fait similaire avec AA^T peut être effectué.

On sait que multiplier une matrice (à droite ou à gauche) par une matrice inversible ne change pas le rang, donc $\operatorname{rg}(A) = \operatorname{rg}(U\Sigma V^T) = \operatorname{rg}(\Sigma)$ est le nombre de coefficients $\Sigma_{i,i}$ non nuls.

Définition 3.31. [Valeurs singulières d'une matrice réelle] Les racines carrées des valeurs propres de A^TA sont appelées valeurs singulières de la matrice A. Une décomposition $A = U\Sigma V^T$ comme dans le théorème 3.30 s'appelle une décomposition en valeurs singulières de A. Si $p \leq N$, les nombres $\Sigma_{i,i}$, $1 \leq i \leq p$, sont exactement les valeurs singulières de la matrice A. Si $N \leq p$, les valeurs singulières de la matrice A sont exactement les nombres $\Sigma_{i,i}$, $1 \leq i \leq N$ et 0 apparaissant p - N fois.

Exemple 3.32. On considère la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_{2,3}(\mathbb{R}).$$

On cherche les valeurs singulières de A en calculant

$$A^T A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_3(\mathbb{R}),$$

dont les valeurs propres sont 0, 0 et 2 (qui sont bien positives). Les valeurs singulières de A sont donc $\sqrt{2}$, 0 et 0. On est dans le cas N=2< p=3: les coefficients diagonaux de $\Sigma\in\mathcal{M}_{2,3}(\mathbb{R})$ sont donc $\sqrt{2}$ et 0. Pour déterminer V, on cherche les vecteurs propres de A^TA associées aux valeurs propres en ordre décroissant. On trouve la matrice orthogonale

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ensuite, la première colonne de U est

$$\frac{1}{\sqrt{2}}AVe_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\1 \end{pmatrix},$$

et pour la deuxième colonne (s = 1), il suffit de choisir un vecteur normé orthogonal à celui-ci : par exemple $\frac{1}{\sqrt{2}}(-1,1)^T$. Cela donne donc la matrice orthogonale

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathcal{M}_{2,2}(\mathbb{R}).$$

Au final, on a une décomposition en valeurs singulières de A:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T = U \Sigma V^T.$$

Parmi les utilisations de la décomposition en valeurs singulières, on peut citer l'approximation à petit rang d'une matrice. Pour $1 \leq \ell \leq \min(N, p)$ donné, on peut en effet montrer (théorème de Eckart-Young) que, parmi toutes les matrices A' de rang ℓ donné, celle qui minimise $\sum_{i,j=1}^{N} (A_{i,j} - A'_{i,j})^2$ est donnée par $A'_* = U\Sigma_*V^T$, où Σ_* est la matrice diagonale (de taille (N, p)) de coefficients diagonaux $\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \ldots, \sqrt{\lambda_\ell}, 0, \ldots, 0$.

3.6 Décomposition polaire

Dans \mathbb{C} , on sait que tout nombre complexe peut s'écrire sous forme polaire $\rho e^{i\theta}$, avec $\rho \geqslant 0$ et $\theta \in \mathbb{R}$. L'analogue matriciel s'appelle la décomposition polaire.

Théorème 3.33. [Décomposition polaire d'une matrice réelle carrée] Soit $N \in \mathbb{N}^*$ donné et $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$. Il existe $Q \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ orthogonale et $S \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ réelle symétrique et positive (c'est-à-dire à valeurs propres positives) telles que

$$A = QS$$
.

Si A est inversible, alors le couple (Q, S) est unique.

Preuve. On peut faire une preuve rapide de l'existence si l'on dispose du théorème 3.30. En effet, on écrit une décomposition en valeurs singulières de $A: A = U\Sigma V^T$, avec $U, V \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ orthogonales et Σ réelle, de taille (N, N), symétrique à coefficients diagonaux positifs. On en déduit

$$A = U\Sigma V^T = UV^T V\Sigma V^T$$

Il suffit alors de poser $Q = UV^T \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ qui est bien orthogonale comme produit de deux matrices orthogonales et $S = V\Sigma V^T \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ qui est bien réelle symétrique $(S^T = (V\Sigma V^T)^T = V\Sigma V^T = S$ car $\Sigma \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ est diagonale) et à valeurs propres positives (ce sont les coefficients diagonaux de Σ). L'existence est donc démontrée.

Montrons ensuite l'unicité du couple (Q,S) lorsque A est inversible. Supposons donc que (\tilde{Q},\tilde{S}) soit un autre couple convenant. Alors,

$$A^T A = (\tilde{O}\tilde{S})^T (\tilde{O}\tilde{S}) = \tilde{S}\tilde{O}^T \tilde{O}\tilde{S} = \tilde{S}^2.$$

En outre, par construction d'une décomposition en valeurs singulières (avec N=p), on a

$$A^T A = V \Sigma^2 V^T = V \text{Diag}(\mu_1, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_2, \dots, \mu_r, \dots, \mu_r) V^T,$$

où les μ_i , $1 \leqslant i \leqslant r$, sont les valeurs propres distinctes de A^TA , qui apparaissent donc chacun avec une multiplicité $m_i \in \mathbb{N}^*$. On veut montrer que $\tilde{S} = V\Sigma V^T$, ou, ce qui revient au même, $V^T\tilde{S}V = \Sigma$. On note $\hat{S} = V^T\tilde{S}V$, de sorte que l'on a

$$\hat{S}^2 = (V^T \tilde{S} V)(V^T \tilde{S} V) = V^T \tilde{S}^2 V = \text{Diag}(\mu_1, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_2, \dots, \mu_r, \dots, \mu_r),$$

avec \hat{S} réelle, symétrique, et à valeurs propres positives. En fait, le μ_i sont strictement positifs, puisque

$$\prod_{i=1}^{r} \mu_{i}^{m_{i}} = \det \left(\operatorname{Diag}(\mu_{1}, \dots, \mu_{1}, \mu_{2}, \dots, \mu_{2}, \dots, \mu_{r}, \dots, \mu_{r}) \right)$$
$$= \det(V^{T} \tilde{S}^{2} V) = \det(\tilde{S}^{2}) = \det(A^{T} A) = \det^{2}(A) > 0,$$

vu que A est supposée inversible.

Montrons dans un premier temps que \hat{S} est diagonale par blocs, les blocs étant les mêmes que ceux de $\text{Diag}(\mu_1, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_2, \dots, \mu_r, \dots, \mu_r)$. Soit alors, par exemple, $1 \leq i \leq m_1 < j \leq m_2$, et formons $(\hat{S}e_i) \cdot e_j$, qui est le coefficient (i,j) de \hat{S} . Comme $\hat{S}^2e_j = \mu_2e_j$, on a

$$\begin{split} (\hat{S}e_i) \cdot e_j &= (\hat{S}e_i) \cdot \left(\frac{\hat{S}^2 e_j}{\mu_2}\right) = \frac{1}{\mu_2} (\hat{S}e_i) \cdot (\hat{S}\hat{S}e_j) \\ &= \frac{1}{\mu_2} (\hat{S}^2 e_i) \cdot (\hat{S}e_j) \qquad \text{car } \hat{S} \text{ est symétrique} \\ &= \frac{1}{\mu_2} (\mu_1 e_i) \cdot (\hat{S}e_j) \\ &= \frac{\mu_1}{\mu_2} (\hat{S}e_i) \cdot e_j \qquad \text{car } \hat{S} \text{ est symétrique.} \end{split}$$

Étant donné que $\mu_1 \neq \mu_2$, cela impose $(\hat{S}e_i) \cdot e_j = 0$. Ainsi, \hat{S} est bien diagonale par blocs :

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{S}_1 & & (0) \\ & \ddots & \\ (0) & & \hat{S}_r \end{pmatrix},$$

où chaque bloc \hat{S}_i , $1 \leq i \leq r$, est carré de taille m_i . La relation

$$\hat{S}^2 = \text{Diag}(\mu_1, \dots, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_2, \dots, \mu_r, \dots, \mu_r)$$

devient alors $\hat{S}_i^2 = \mu_i \mathbf{I}_{m_i}$ pour $1 \leqslant i \leqslant r$, ce qui entraîne

$$(\hat{S}_i - \sqrt{\mu_i} \mathbf{I}_{m_i})(\hat{S}_i + \sqrt{\mu_i} \mathbf{I}_{m_i}) = 0 \in \mathcal{M}_{m_i}(\mathbb{R}).$$

La matrice $\hat{S}_i + \sqrt{\mu_i} I_{m_i}$ est inversible car si $X \in \mathcal{M}_{m_i,1}(\mathbb{R}) \setminus \{0\}$ est dans le noyau de cette matrice, alors

$$0 = ((\hat{S}_i + \sqrt{\mu_i} \mathbf{I}_{m_i}) X) \cdot X = (\hat{S}_i X) \cdot X + \sqrt{\mu_i} ||X||^2,$$

ce qui est impossible car $\sqrt{\mu_i} > 0$ et $(\hat{S}_i X) \cdot X \geqslant 0$ puisque \hat{S} est supposée positive (voir la définition 3.23). Par conséquent, on peut simplifier à droite par $\hat{S}_i + \sqrt{\mu_i} I_{m_i} \in GL_{m_i}(\mathbb{R})$ et obtenir

$$\hat{S}_i = \sqrt{\mu_i} \mathbf{I}_{m_i},$$

ce qui donne

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{S}_1 & & (0) \\ & \ddots & \\ (0) & & \hat{S}_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\mu_1} \mathbf{I}_{m_1} & & (0) \\ & \ddots & \\ (0) & & \sqrt{\mu_r} \mathbf{I}_{m_r} \end{pmatrix} = \Sigma$$

et conclut l'unicité de S. Celle pour Q en découle car $\tilde{Q}=A\tilde{S}^{-1}.$

Bibliographie

- [1] Bravais, A. Analyse mathématique sur les probabilités des erreurs de situation d'un point. Mem. Acad. Roy. Sci. Inst. France. Sci. Math, et Phys. 9 : 255-332 (1844).
- [2] Galton, F. Co-relations and their measurement, chiefly from anthropometric data. *Proc. Roy. Soc. London* 45 (1888), 135-145.
- [3] Gauss, C. F., Theoria Motus Corporum coelestium in section i bus solem ambieniiem (Hamburg, 1809). Œuvres, t. VII (1871).
- [4] Gram, J.P. Om Rækkeudviklinger, bestemte ved Hjælp af de mindste Kvadraters Methode (en danois) Kjobenhav. Diss. 122 S. (1879).
- [5] Gram, J.P. Ueber die Entwickelung reeller Functionen in Reihen mittelst der Methode der kleinsten Quadrate. J. Reine Angew. Math. 94 (1883), 41–73.
- [6] Grifone, J. Algèbre Linéaire (6e édition), Cépaduès, 2018.
- [7] Hull, J. Risk Management and Financial Institutions, 5ème Edition. Wiley (2018).
- [8] Lascaux, P. et Théodor, R. Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur. Tome 1 Méthodes directes & Tome 2 Méthodes itératives. Dunod (2000).
- [9] Legendre A.-M., Nouvelles Méthodes pour la détermination des Orbites des Comètes (Paris, 1805).
- [10] Leon, S. J. and Björck, Å. and Gander, W. Gram-Schmidt orthogonalization: 100 years and more. Numer. Linear Algebra Appl. 20, no. 3 (2013), 492–532.
- [11] Olver, P. J. et Shakiban, C., Applied linear algebra (2ème édition), Cham, Switzerland; Springer 2018.
- [12] Pearson, K. Contributions to the mathematical theory of evolution. *Philos. Trans. R. Soc. Lond., Ser. A, Contain. Pap. Math. Phys. Character* 187 (1896), 253–318.
- [13] Schatzman M. Analyse numérique : une approche mathématique cours et exercices (2e édition revue et augmentée), Dunod, Sciences sup Mathématiques, 2001.
- [14] Schmidt, E. Zur Theorie der linearen und nichtlinearen Integralgleichungen. I. Teil: Entwicklung willkürlicher Funktionen nach Systemen vorgeschriebener. *Math. Ann.* (1907), 433–476.
- [15] Schwarz, H. Über ein die Flächen kleinsten Flächeninhalts betreffendes Problem der Variationsrechnung, Acta Societatis scientiarum Fennicae, Vol. 15 (1888), p. 31.
- [16] Stoer, J. et Bulirsch, R., Introduction to Numerical Analysis, 3ème édition, Springer (2002).
- [17] Strang, G. Linear algebra and learning from data Wellesley, MA: Wellesley-Cambridge Press, 2019.

Liste des définitions, questions de cours et démonstrations à savoir refaire

• Liste des énoncés de théorème/proposition et des définitions à connaître :

Théorème 3.25 [Une matrice de covariance est positive]

```
Chapitre I
   Théorème 1.6 [Inégalité de Cauchy(-Schwarz)]
   Définition 1.11 [Vecteurs orthogonaux, orthogonal d'une partie, sous-espaces orthogonaux]
   Théorème 1.14 [Théorème de Pythagore]
   Définition 1.15 [Angle entre deux vecteurs]
   Définition 1.19 [Famille orthogonale, famille orthonormée, base orthonormée]
   Corollaire 1.25 [Décomposition dans une base orthonormée]
   Théorème 1.27 [Théorème d'orthonormalisation de Gram-Schmidt]
   Définition 1.33 [Endomorphisme de \mathbb{R}^N autoadjoint]
   Proposition 1.35 [Caractérisation des endomorphismes autoadjoints] (i) à (iv)
   Théorème 1.37 [Théorème de projection orthogonale sur un sous-espace vectoriel de \mathbb{R}^N] (i) à (iii)
   Théorème 1.40 [Propriétés de \Pi_F] (i) à (vi)
   Théorème 1.50 [Caractérisation des matrices de projection orthogonale] (i) à (iii)
   Théorème 1.52 [Théorème de l'alternative] (i) et (ii)
   Chapitre II
   Théorème 2.1 [Pseudo-solution au sens des moindres carrés pour un système surdéterminé]
   Théorème 2.4 [Solution au sens des moindres carrés pour un système sousdéterminé]
   Théorème 2.6 [Droite des moindres carrés]
   Définition 2.8 [Coefficient R^2 de détermination linéaire]
   Chapitre III
   Proposition 3.2 [Caractérisations des matrices orthogonales] (i) à (vi)
   Proposition 3.5 [Caractérisations des isométries] (i) à (vi)
   Définition 3.9 [Valeur propre, vecteur propre] pour une matrice.
   Définition 3.12 [Polynôme caractéristique] (d'une matrice)
   Définition 3.14 [Sous-espace propre] (d'un endomorphisme)
   Théorème 3.19 [Théorème spectral pour un endomorphisme autoadjoint] (i) à (iii)
   Théorème 3.20 [Théorème spectral pour une matrice réelle symétrique] (i) à (iii)
   Définition 3.24 [Matrice de covariance]
   Définition 3.27 [Analyse en Composantes Principales]
   Théorème 3.28 [Décomposition QR d'une matrice carrée]
   Théorème 3.30 [Décomposition en valeurs singulières d'une matrice réelle]
• Liste des démonstrations à savoir refaire :
   Chapitre I
   Démontrer l'inégalité triangulaire (proposition 1.8 (iii)) avec son cas d'égalité
   Théorème 1.14 [Théorème de Pythagore] et proposition 1.5 (i)
   Montrer qu'une famille orthonormée dans \mathbb{R}^N est libre, (proposition 1.22 (i))
   Théorème 1.52 [Théorème de l'alternative] (i) Ker(A^T) = ... et Im(A^T) = ...
   Chapitre II
   Aucune.
   Chapitre III
   Proposition 3.17 [Orthogonalité de sous-espaces propres associés à des valeurs propres distinctes]
```