Dans ce TD consacré à la décomposition QR d'une matrice A, on adoptera les notations suivantes :
— n la taille de A.
— $a_1, a_2, \ldots, a_n$ les colonnes de A. Chaque a_j est donc un vecteur de $\mathbb{R}^n$.
— $q_1, q_2, \ldots, q_n$ les colonnes de Q. Chaque q_j est donc un vecteur de $\mathbb{R}^n$.
— On notera r_{ij} les coefficients de la matrice R.

Calcul d'une décomposition QR par la méthode de Gram-Schmidt

On rappelle ici le procédé de décomposition QR d'une matrice inversible A, appelé « procédé d'orthonormalisation de Gram-Schmidt ».
Ce procédé se décompose en n étapes. La j-ième étape contient le calcul des j-ième colonnes de Q et de R, et utilise les colonnes précédemment calculées de Q.
La j-ième étape se décrit ainsi :

1. Le calcul, pour chaque i avec $i < j$, des coefficients de R par la formule $r_{ij} =< a_j, q_i >$.
2. Le calcul d'un vecteur $w_j = a_j - \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1} r_{kj} q_k$.
3. Le calcul de $r_{jj} = \|w_j\|$.
4. Enfin le calcul de $q_j = \dfrac{w_j}{r_{jj}}$.

Exercise n°1. Décomposer la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 6 & 6 & 16 \\ -3 & -9 & -2 \\ 6 & -6 & -8 \end{pmatrix}$$

Et vérifier qu'on a bien une décomposition QR. Posons $a_1 = \begin{pmatrix} 6 \\ -3 \\ 6 \end{pmatrix}$, $a_2 = \begin{pmatrix} 6 \\ -9 \\ -6 \end{pmatrix}$ et $a_3 = \begin{pmatrix} 16 \\ -2 \\ -8 \end{pmatrix}$. En suivant les étapes de l'algorithme de Gram-Schmidt, on a

Etape 1. prenons $j = 1$, nous avons

1. Comme les indices commencent avec $i = 1$ donc il n'y a aucun i avec $i < 1$. Par conséquent r_{i1} n'existe pas et il n'y a rien à calculer.
2. Comme $j = 1$, le calcul de w_1 se réduit à $w_1 = a_1$.
3. On pose $r_{11} = ||w_1|| = ||a_1|| = 9$.
4. On construit $q_1 = \frac{w_1}{r_{11}} = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 6 \\ -3 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/3 \\ -1/3 \\ 2/3 \end{pmatrix}$.

Etape 2. prenons $j = 2$, nous avons

1. $i < 2$, donc il faut donc calculer r_{12}. Par définition, on a

$$r_{12} = < a_2, q_1 > = q_1^t a_2 = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 6 \\ -9 \\ -6 \end{pmatrix}$$
$$= \left(\frac{2}{3} \times 6 - \frac{1}{3} \times (-9) + \frac{2}{3} \times (-6) = 4 + 3 - 4 = 3. \right.$$

2. On calcule $w_2 = a_2 - r_{12} q_2 = \begin{pmatrix} 6 \\ -9 \\ -6 \end{pmatrix} - 3 \begin{pmatrix} 2/3 \\ -1/3 \\ 2/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ -8 \\ -8 \end{pmatrix}$.
3. On pose $r_{22} = ||w_2|| = \sqrt{4^2 + (-8)^2 + (-8)^2} = \sqrt{144} = 12$.
4. On construit $q_2 = \frac{w_2}{r_{22}} = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 4 \\ -8 \\ -8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 \\ -2/3 \\ -2/3 \end{pmatrix}$.

Etape 2. prenons $j = 3$, nous avons

1. $i < 3$, donc il faut donc calculer r_{13} et r_{23}. Par définition, on a

$$r_{13} = < a_3, q_1 > = q_1^t a_3 = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 16 \\ -2 \\ -8 \end{pmatrix} = 6,$$
$$r_{23} = < a_3, q_2 > = q_2^t a_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 16 \\ -2 \\ -8 \end{pmatrix} = 12.$$

2. On calcule $w_3 = a_3 - (r_{13} q_1 + r_{23} q_2) = \begin{pmatrix} 16 \\ -2 \\ -8 \end{pmatrix} - 6 \begin{pmatrix} 2/3 \\ -1/3 \\ 2/3 \end{pmatrix} - 12 \begin{pmatrix} 1/3 \\ -2/3 \\ -2/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 8 \\ -4 \end{pmatrix}$.
3. On pose $r_{33} = ||w_3|| = \sqrt{8^2 + 8^2 + (-4)^2} = \sqrt{144} = 12$.
4. On construit $q_3 = \frac{w_3}{r_{33}} = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 8 \\ 8 \\ -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2/3 \\ 2/3 \\ -1/3 \end{pmatrix}$.

Par conséquent, les matrices de la décomposition QR sont

$$Q = \begin{array}{c} \begin{matrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} 2/3 & 1/3 & 2/3 \\ -1/3 & -2/3 & 2/3 \\ 2/3 & -2/3 & -1/3 \end{pmatrix} \end{array}, \quad R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & 0 & r_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & 3 & 6 \\ 0 & 12 & 12 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}.$$

Exercise n°2. Résoudre le système $AX = B$ avec A définie à la question précédente et

$$B = \begin{pmatrix} -32 \\ 10 \\ 28 \end{pmatrix}$$

(à l'aide de la décomposition QR calculée).

Exercise n°3. Dans cet exercice et le suivant, on va justifier l'algorithme de Gramm-Schmidt.
Dans un premier temps, on suppose qu'on a une décomposition QR de A.
Montrer les propriétés suivantes :

— Pour $i > j$, on a $r_{ij} = 0$.

— Les vecteurs $(q_1, q_2, \ldots, q_n)$ constituent une base orthonormée de $\mathbb{R}^n$.

— On a les formules suivantes :

$$\forall j,\ a_j = \sum_{k=1}^{j} r_{kj} q_k$$

— On a pour $k \leqslant j$, la formule $r_{kj} =< a_j, q_k >$.

Exercise n°4. On va justifier que le procédé peut être appliqué à toute matrice inversible A réelle, et qu'elle aboutit bien à une décomposition QR de A.

1. On suppose que l'on a déjà pu réaliser la construction des colonnes précédant la colonne j de Q et R, et on va chercher à démontrer que le calcul de la colonne j est possible.
   (a) Montrer que pour $p < j$, on a
   $$a_p = \sum_{k=1}^{p} r_{kp} q_k$$
   (b) Montrer que le seul cas où on ne pourrait pas réaliser toute l'étape j serait la situation où w_j est nul.
   (c) On suppose $w_j = 0$. Déterminer une expression de a_j en fonction des q_k pour $k < j$.
   (d) Que peut-on dire alors de la famille $(a_1, a_2, \ldots, a_j)$? Conclure.
2. On cherche maintenant à montrer que le procédé permet bien de calculer une décomposition QR.
   (a) Montrer
   $$\forall j,\ a_j = \sum_{k=1}^{j} r_{kj} q_k$$
   et en déduire que $A = QR$.
   (b) On va démontrer de proche en proche que chaque famille $(q_1, q_2, q_3, \ldots, q_j)$ est une famille orthonormée.
      i. Montrer que c'est le cas pour $j = 1$.
      ii. On suppose que c'est le cas pour j avec $j < n$. Montrer que c'est aussi le cas pour $j + 1$. On commencera par examiner les différents produits scalaires $< w_{j+1}, q_k >$ pour $k \leqslant j$.
   (c) En déduire que Q est orthogonale.
3. Conclure.

Exercise n°5. Estimer le nombre d'opérations élémentaires exigées par le calcul de cette décomposition.

Exercise n°6. Montrer que pour toute matrice inversible A, il existe une et une seule décomposition QR où tous les coefficients diagonaux de R sont strictement positifs.