

Clase No. 13:

# Factorización QR

---

**MAT-251**

# Factorización QR

---

Sea  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$  con  $m \geq n$ . La factorización QR de  $\mathbf{A}$  es

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR} = [\mathbf{Q}_1 \quad \mathbf{Q}_2] \begin{bmatrix} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1$$

donde  $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times m}$  es una matriz ortogonal y  $\mathbf{R}_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$  es una matriz triangular superior. Se dice que la matriz  $\mathbf{R}$  es trapezoidal superior.

Esta factorización es útil para resolver sistemas de ecuaciones lineales, problemas de mínimos cuadrados y problemas de eigenvalores.

Las maneras más comunes de calcular la factorización QR son aplicando

- las transformaciones de Householder,
- las rotaciones de Givens,
- el proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt.

# Transformaciones de Householder

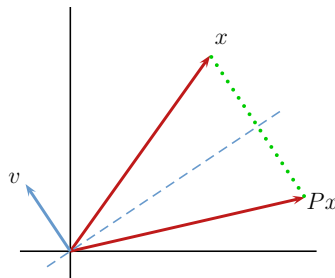
Sea  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ ,  $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ . La matriz de Householder se define como

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \frac{2}{\mathbf{v}^T \mathbf{v}} \mathbf{v} \mathbf{v}^T.$$

La matriz es simétrica y ortogonal y, por tanto,  $\mathbf{P}^2 = \mathbf{I}$ .

La figura muestra porque se le llama reflexión.

El objetivo de esta matriz es usarla para producir ceros en la matriz que queremos factorizar. Para hacerlo, debemos considerar el problema:  
Dados los vectores  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{y}$ , ¿cómo calculmos  $\mathbf{P}$  tal que  $\mathbf{P}\mathbf{x} = \mathbf{y}$ ?



# Cálculo de la transformación de Householder

---

- Puesto que  $\mathbf{P}$  realiza una reflexión, se debe cumplir que  $\|\mathbf{y}\|_2 = \|\mathbf{x}\|_2$  para poder calcular  $\mathbf{P}$ .
- Hay que notar que  $\mathbf{P}$  es invariante a la escala de  $\mathbf{v}$ .
- $\mathbf{x} - \mathbf{y}$  tiene la dirección del vector que queremos.

Así, podemos definir  $\mathbf{v} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$ .

# Cálculo de la transformación de Householder

---

- Puesto que  $\mathbf{P}$  realiza una reflexión, se debe cumplir que  $\|\mathbf{y}\|_2 = \|\mathbf{x}\|_2$  para poder calcular  $\mathbf{P}$ .
- Hay que notar que  $\mathbf{P}$  es invariante a la escala de  $\mathbf{v}$ .
- $\mathbf{x} - \mathbf{y}$  tiene la dirección del vector que queremos.

Así, podemos definir  $\mathbf{v} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$ .

Para que  $\mathbf{P}$  produzca el mayor número de ceros, debemos tener que  $\mathbf{y} = \sigma \mathbf{e}_1$ , donde  $\mathbf{e}_1$  es el vector canónico que tiene un 1 como primer elemento y el resto son ceros, y  $\sigma = \pm \|\mathbf{x}\|$ . Entonces

$$\mathbf{v} = \mathbf{x} - \mathbf{y} = \mathbf{x} - \sigma \mathbf{e}_1.$$

# Cálculo de la transformación de Householder

- Puesto que  $\mathbf{P}$  realiza una reflexión, se debe cumplir que  $\|\mathbf{y}\|_2 = \|\mathbf{x}\|_2$  para poder calcular  $\mathbf{P}$ .
- Hay que notar que  $\mathbf{P}$  es invariante a la escala de  $\mathbf{v}$ .
- $\mathbf{x} - \mathbf{y}$  tiene la dirección del vector que queremos.

Así, podemos definir  $\mathbf{v} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$ .

Para que  $\mathbf{P}$  produzca el mayor número de ceros, debemos tener que  $\mathbf{y} = \sigma \mathbf{e}_1$ , donde  $\mathbf{e}_1$  es el vector canónico que tiene un 1 como primer elemento y el resto son ceros, y  $\sigma = \pm \|\mathbf{x}\|$ . Entonces

$$\mathbf{v} = \mathbf{x} - \mathbf{y} = \mathbf{x} - \sigma \mathbf{e}_1.$$

Sea  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ . Para evitar errores por sustracción conviene definir

$$\sigma = -\text{sign}(x_1) \|\mathbf{x}\|.$$

# Uso de la transformación de Householder (I)

El proceso se ilustra en la siguiente figura para una matriz  $4 \times 3$ .

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\hat{\mathbf{P}}_1} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\hat{\mathbf{P}}_2} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\hat{\mathbf{P}}_3} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \mathbf{R}$$

Sea  $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}$  y  $\mathbf{a}_1$  su primer columna. Calculamos la matriz de Householder  $\mathbf{P}_1$  tal que  $\mathbf{P}_1 \mathbf{a}_1 = \sigma \mathbf{e}_1$ , con  $\sigma = -\text{sign}(a_{11}) \|\mathbf{a}_1\|$ , y hagamos  $\hat{\mathbf{P}}_1 = \mathbf{P}_1$ . Así,  $\mathbf{A}_2 = \hat{\mathbf{P}}_1 \mathbf{A}_1$  tiene ceros en la primera columna, excepto en el primer elemento.

En el paso  $k$ -ésimo tenemos

$$\mathbf{A}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{k-1} & \mathbf{z}_k & \mathbf{B}_k \\ \mathbf{0} & \mathbf{x}_k & \mathbf{C}_k \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}_{k-1} \in \mathbb{R}^{(k-1) \times (k-1)}, \quad \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^{m-k+1}, \quad \mathbf{z}_k \in \mathbb{R}^{k-1}$$

y  $\mathbf{R}_{k-1}$  es triangular superior. Definimos la matriz de Householder  $\mathbf{P}_k$  tal que  $\mathbf{P}_k \mathbf{x}_k = \sigma \mathbf{e}_1$ , con  $\sigma = -\text{sign}(x_{k1}) \|\mathbf{x}_k\|$ , y definimos

$$\hat{\mathbf{P}}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{k-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{P}_k \end{bmatrix}$$

# Uso de la transformación de Householder (II)

$$\mathbf{A}_{k+1} = \hat{\mathbf{P}}_k \mathbf{A}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{k-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{P}_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{k-1} & \mathbf{z}_k & \mathbf{B}_k \\ \mathbf{0} & \mathbf{x}_k & \mathbf{C}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{k-1} & \mathbf{z}_k & \mathbf{B}_k \\ \mathbf{0} & \sigma \mathbf{e}_1 & \mathbf{P}_k \mathbf{C}_k \end{bmatrix}$$

- No es necesario construir las matrices de Householder. Es suficiente con determinar  $\mathbf{v}$ , puesto que

$$\mathbf{P}_k \mathbf{C}_k = (\mathbf{I} - \beta \mathbf{v} \mathbf{v}^T) \mathbf{C}_k = \mathbf{C}_k - \beta \mathbf{v} (\mathbf{v}^T \mathbf{C}_k),$$

con  $\beta = 1/\mathbf{v}^T \mathbf{v}$ .

- Definimos  $\mathbf{Q} = \hat{\mathbf{P}}_1 \hat{\mathbf{P}}_2 \cdots \hat{\mathbf{P}}_n$ .
- Es mejor hacer el cálculo de  $\mathbf{Q}$  multiplicando de derecha a izquierda.
- El número de operaciones es  $2n^2(m - n/3)$ .



# Rotaciones de Givens (I)

Una rotación de Givens,  $G(i, j, \theta) = [g_{ij}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , es una matriz que coincide con la matriz identidad, excepto en cuatro entradas:

$$g_{ii} = g_{jj} = \cos \theta = c, \quad g_{ij} = \sin \theta = s, \quad g_{ji} = -\sin \theta = -s.$$

$$G(i, j, \theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & c & \cdots & s & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & -s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & 0 & \vdots & 0 & \vdots & 1 \end{bmatrix}$$

# Rotaciones de Givens (II)

Si  $\mathbf{y} = G(i, j, \theta)\mathbf{x}$ , entonces

$$y_k = \begin{cases} x_k & k \neq i, j, \\ cx_i + sx_j & k = i, \\ -sx_i + cx_j & k = j. \end{cases}$$

Si  $y_j = 0$ , entonces

$$s = \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \quad c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}$$

Las rotaciones de Givens son usadas para crear ceros, uno a la vez. La siguiente figura ilustra el proceso.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\hat{\mathbf{G}}_{41}} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\hat{\mathbf{G}}_{31}} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\hat{\mathbf{G}}_{21}} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix}$$

# Rotaciones de Givens (III)

$$\hat{\mathbf{G}}_{42} \rightarrow \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\hat{\mathbf{G}}_{32}} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{\hat{\mathbf{G}}_{43}} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \mathbf{R}$$

En general, se genera una secuencia  $\mathbf{G}_k$  de rotaciones de Givens tales que

$$\mathbf{G}_s \mathbf{G}_{s-1} \cdots \mathbf{G}_1 \mathbf{A} = \mathbf{R}.$$

Tenemos que  $\mathbf{G}_k^T \mathbf{G}_k = \mathbf{I}$ , por lo que

$$\mathbf{Q} = \mathbf{G}_1^T \cdots \mathbf{G}_{s-1}^T \mathbf{G}_s^T.$$

- El número de operaciones realizadas es  $3n^2(m - n/3)$ .
- Este número es mayor que cuando se usan reflexiones de Householder.
- Aun así, hay casos en los que conviene más aplicar las rotaciones de Givens para calcular la factorización QR.

# Ortogonalización de Gram-Schmidt (I)

## Proceso de Gram-Schmidt

Sea  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$  un conjunto de  $n$  vectores linealmente independientes. Entonces podemos construir un conjunto  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$  de vectores ortogonales con el siguiente proceso. Iniciamos haciendo  $\mathbf{v}_1 = \mathbf{x}_1$ .

$$\mathbf{v}_k = \mathbf{x}_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{\mathbf{x}_k^T \mathbf{v}_i}{\|\mathbf{v}_i\|^2} \mathbf{v}_i \quad \text{para } k = 2, \dots, n$$

Usando el proceso de orthogonalización de Gram-Schmidt se puede calcular la factorización directamente de la ecuación  $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$ , con  $\mathbf{A}, \mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $\mathbf{Q}$  ortonormal y  $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

Denotemos por  $\mathbf{a}_j$  y  $\mathbf{q}_j$  a las columnas de la matrices  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{Q}$ , respectivamente. Entonces

$$\mathbf{a}_j = \sum_{k=1}^j r_{kj} \mathbf{q}_k$$

# Ortogonalización de Gram-Schmidt (II)

Supongamos que para  $i = 1, \dots, j-1$  ya tenemos determinadas las columnas  $\mathbf{q}_i^T$  de  $\mathbf{Q}$ . Por la ortonormalidad de las columnas de  $\mathbf{Q}$ , se debe tener que

$$\mathbf{q}_i^T \mathbf{a}_j = \sum_{k=1}^j r_{kj} \mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_k = r_{ij} \quad (1)$$

Entonces podemos definir

$$\mathbf{q}_j = \frac{1}{r_{jj}} \mathbf{v}_j, \quad (2)$$

donde

$$\mathbf{v}_j = \mathbf{a}_j - \sum_{k=1}^{j-1} r_{kj} \mathbf{q}_k, \quad r_{jj} = \|\mathbf{v}_j\|. \quad (3)$$

De esta forma, (1) y (3) nos dan los elementos de la columna  $j$  de la matriz  $\mathbf{Q}$  y  $\mathbf{R}$ . Así, podemos ir construyendo columna por columna.

El costo computacional es de  $2mn^2$ .

# Solución de mínimos cuadrados usando QR (I)

Sea  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$  con  $m \geq n$  y  $\text{rank}(\mathbf{A}) = n$ . Si  $\mathbf{A}$  tiene una factorización QR, entonces

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

entonces

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 = \|\mathbf{Q}^T\|_2^2 \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 = \|\mathbf{Q}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{Q}^T \mathbf{b}\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{Rx} - \mathbf{c} \\ -\mathbf{d} \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

donde  $\begin{bmatrix} \mathbf{c} \\ \mathbf{d} \end{bmatrix} = \mathbf{Q}^T \mathbf{b}$ . Así,

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 = \|\mathbf{Rx} - \mathbf{c}\|_2^2 + \|\mathbf{d}\|_2^2.$$

Se sigue que la solución (única) de mínimos cuadrados es  $\mathbf{x} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{c}$  y que el residual es  $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 = \|\mathbf{d}\|_2^2$ .

# Cálculo de eigenvalores basado en QR

## Algoritmo basado en QR

Dada la matriz  $\mathbf{A}^{(0)}$  y fijar  $k = 0$ . Iterar los siguientes pasos hasta convergencia:

❶  $\mathbf{Q}^{(k)} \mathbf{R}^{(k)} = \mathbf{A}^{(k)}.$

❷  $\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{R}^{(k)} \mathbf{Q}^{(k)}.$

❸  $k = k + 1.$

En la diagonal de la última matriz  $\mathbf{A}^{(k)}$  generada se encuentran los eigenvalores de la matriz  $\mathbf{A}^{(0)}$ .

Un criterio para convergencia es que ver si  $\mathbf{Q}^{(k)} = [q_{ij}^{(k)}]$  se cumple que

$$\left| 1 - |q_{ij}^{(k)}| \right| < \tau, \quad \left| q_{ij}^{(k)} \right| < \tau, \quad i \neq j;$$

para alguna tolerancia dada  $\tau$ .

# Ejemplo del cálculo de eigenvalores (I)

---

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & 1 & -1 \\ 0 & 6 & 1 \\ 1 & 0 & -5 \end{bmatrix}$$

$$\sigma(\mathbf{A}) \approx \{-4.8895981, 4.8122812, 6.0773169\}.$$

En  $k = 1152$  iteraciones se tiene que

$$\mathbf{Q}^{(k)} = \begin{bmatrix} -1. & -3.91 \times 10^{-109} & -3.58 \times 10^{-116} \\ 3.91 \times 10^{-109} & -1.00 & -0.0000002 \\ 2.92 \times 10^{-116} & -0.0000002 & 1. \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} 6.0773169 & -0.6599920 & -0.7851245 \\ 1.91 \times 10^{-108} & -4.8895982 & 2.224407 \\ 1.40 \times 10^{-115} & -0.0000008 & 4.8122813 \end{bmatrix}$$



# Método iterativo de Jacobi (I)

Sea  $\mathbf{A}^{(0)} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  una matriz simétrica y  $\mathbf{G}(i, j, \theta)$  una rotación de Givens. Entonces  $\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{G}^T \mathbf{A}^{(0)} \mathbf{G}$  es una matriz simétrica similar a  $\mathbf{A}^{(0)}$ . Además, tenemos la siguiente relación entre las entradas de las matrices:

$$\begin{aligned}A_{ii}^{(1)} &= c^2 A_{ii}^{(0)} - 2sc A_{ij}^{(0)} + s^2 A_{jj}^{(0)} \\A_{jj}^{(1)} &= s^2 A_{ii}^{(0)} + 2sc A_{ij}^{(0)} + c^2 A_{jj}^{(0)} \\A_{ij}^{(1)} &= (c^2 - s^2) A_{ij}^{(0)} + sc(A_{ii}^{(0)} - A_{jj}^{(0)}) \\A_{ik}^{(1)} &= c A_{ik}^{(0)} - s A_{jk}^{(0)} \quad k \neq i, j \\A_{ij}^{(1)} &= s A_{ik}^{(0)} + A_{jk}^{(0)} \quad k \neq i, j \\A_{kl}^{(1)} &= A_{kl}^{(0)} \quad k, l \neq i, j\end{aligned}$$

Escogemos  $\theta$  de modo que  $A_{ij}^{(1)} = A_{ji}^{(1)} = 0$ . Entonces

$$\tan 2\theta = \frac{2A_{ij}^{(0)}}{A_{jj}^{(0)} - A_{ii}^{(0)}}$$

# Método iterativo de Jacobi (II)

---

- El proceso se repite de forma iterativa definiendo  $\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{G}^T \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{G}$ .
- En cada iteración, para definir los índices  $i$  y  $j$ , lo ideal es escoger el elemento  $A_{ij}^{(k)}$  de mayor magnitud para acelerar el proceso.
- En la práctica se van revisando cada elemento fuera de la diagonal, y si es mejor que cierta tolerancia, se aplica el proceso anterior para hacerlo cero.
- Se tienen que dar varios 'barridos' a la matriz porque el proceso iterativo no preserva los ceros que previamente se han creado.

Al final se obtiene una matriz  $\mathbf{A}^{(k)}$  que es diagonal y los elementos en ella corresponden a los eigenvalores de la matriz original.