Práctica 6: Método de eliminación de Householder y factorización A=QR

Análisis Numérico Matricial. Curso 2022-23

Grado en Matemáticas
Doble Grado en Ingeniería Informática y en Matemáticas

USC

1. Método de Householder

El **método de Householder** es un método general de resolución de un sistema lineal:

$$Au = b,\ A \in \mathcal{M}_{n\times n} \text{ invertible.}$$

Consiste en:

- Un *procedimiento de eliminación* que, en $n-1$ etapas, permite tansformar el sistema de partida en otro equivalente con matriz triangular superior:

$$Au = b \Longleftrightarrow H_{n-1}\dots H_1 Au = H_{n-1}\dots H_1 b \Longleftrightarrow Ru = \hat{b}.$$

- La *resolución del sistema triangular superior* resultante, $Ru = \hat{b}$, por *remonte.*

1.1. Matriz de Householder

Definición. Se denomina **matriz de Householder** a toda matriz de la forma:

$$H(v) = I - \frac{2}{v^*v} vv^*, \; v \in \mathbb{C}^n - \{\theta\}.$$

Observación 1. Adviértase que:

$$\forall v \in \mathbb{C}^n - \{\theta\} : H(v) = I - \frac{2}{\|v\|_2^2} vv^* = I - 2\frac{v}{\|v\|_2}\left(\frac{v}{\|v\|_2}\right)^*.$$

Luego:

$$H(v) = H(w), \;\text{ para } w = \frac{v}{\|v\|_2}, \;\text{ siendo } \|w\|_2 = 1.$$

Por tanto, **de ahora en adelante, consideraremos matrices de Householder relativas a vectores unitarios en norma** 2**,** es decir:

$$H(v) = I - 2vv^*, \; \|v\|_2 = 1.$$

1.1.1. Propiedades

(1) Para $v \in \mathbb{C}^n - \{\theta\}$, $H(v)$ es hermitiana y unitaria.

(2) Para $v \in \mathbb{R}^n - \{\theta\}$, $H(v)$ es simétrica y ortogonal.

(3) $\mathrm{sp}(H(v)) = \{-1, 1\}$.

(4) $\det(H(v)) = -1$.

Para simplificar la notación, se representa $\boldsymbol{H(v)}$ por $\boldsymbol{H}$.

(3) Para calcular el espectro de la matriz H, comenzamos calculando:

$$Hv = (I - 2vv^*)v = v - 2v(v^*v) = v - 2v = -v,$$

por tanto $-1 \in \mathrm{sp}(H)$.
Por otra parte, dado w en el conjunto ortogonal al vector v, $w \in < \{v\} >^{\perp}$, es decir $w / \langle w, v \rangle = v^* w = 0$, se obtiene:

$$Hw = (I - 2vv^*)w = w - 2v(v^*w) = w,$$

por tanto $1 \in \mathrm{sp}(H)$.

Conocidas las multiplicidades geométricas de los autovalores -1 y 1, se obtienen sus multiplicidades algebraicas:

$\mathrm{sp}(H)$	subespacio propio	mult. geométr. ($\leq$)	mult. algebr.
-1	E_{-1}	1	1
1	E_1	$n-1$	$n-1$

No puede haber más autovalores, por tanto:

$$\mathrm{sp}(H) = \{-1, 1\}.$$

(4) Basta aplicar la propiedad:

$$\det(A) = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i,\ \lambda_i \in \mathrm{sp}(A),$$

a la matriz H y a su espectro (el autovalor -1 se repite una vez y el autovalor 1 se repite $n-1$ veces) para deducir que $\det(H) = -1$.

1.2. Interpretación geométrica de la transformación mediante una matriz de Householder $H(v)$ para $n = 2$

Para $v \in \mathbb{R}^2 / \, \|v\|_2 = 1$, $H \equiv H(v) = I - 2vv^T$ es una matriz de orden 2.
Dado que cualquier otro vector $x \in \mathbb{R}^2 - \{\theta\}$, se puede expresar como:

$$x = x^{(1)} + x^{(2)}, \, x^{(1)} \in < \{v\} >, \, x^{(2)} \in < \{v\} >^{\perp},$$

se obtiene:

$$Hx = H(x^{(1)} + x^{(2)}) = Hx^{(1)} + Hx^{(2)} = -x^{(1)} + x^{(2)},$$

sin más que utilizar la propiedad (3).

Sean, por ejemplo:

$$v = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

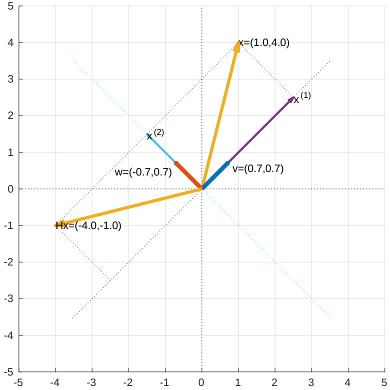
el vector unitario que define la tranformación de Householder $H(v) \equiv H$, y

$$w = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

un vector unitario generador del subespacio ortogonal $< \{v\} >^{\perp}$.

Busca en la siguiente figura los vectores $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \end{pmatrix}$ y Hx.

¿Comprendes que las matrices de Householder también se denominen **reflexiones de Householder?**



A la vista de la anterior interpretación geométrica:

Dado un vector $x = (x1, x2)^T$, $x2 \neq 0$, ¿puedes encontrar algún vector unitario v tal que el nuevo vector $H(v)x$ tenga la segunda componente cero?

Solución

- Para obtener $H(v)x$ en la dirección positiva del eje x, el vector w, que da la dirección ortogonal a v y además es el vector respecto al que se hace la reflexión, debe bisecar el ángulo delimitado por los vectores x y $(1, 0)^T$.
- Para obtener $H(v)x$ en la dirección negativa del eje x, el vector w, que da la dirección ortogonal a v y además es el vector respecto al que se hace la reflexión, debe bisecar el ángulo delimitado por los vectores x y $(-1, 0)^T$.

1.3. Algoritmo de eliminación de Householder[1]

Dado $x \in \mathbb{R}^n - \{\theta\}$, sean:

- $\sigma = \|x\|_2$,
- $\alpha = \begin{cases} \sigma, & \text{si } x_1 > 0, \\ -\sigma, & \text{si } x_1 \leq 0, \end{cases}$
- $\beta = \dfrac{1}{\alpha(\alpha + x_1)}$,
- $w = x + \alpha e_1 = \begin{pmatrix} x_1 + \alpha \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$.

Entonces:

(1) Para $v = \dfrac{w}{\|w\|_2}$ resulta que $H(v) = I - \beta w w^T$.

(2) $H(v)x = -\alpha e_1 = \begin{pmatrix} -\alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$.

[1] J. Stoer y R. Bulirsch. *Introduction to Numerical Analysis*. Springer-Verlag, 1993, pp. 198-203.

Observación 1. La elección del signo de α en el algoritmo de Householder se ha hecho a efectos prácticos, teniendo en cuenta la presencia de la expresión $(\alpha + x_1)$ en el denominador de β, con la intención de evitar la división por un número "demasiado pequeño".

Observación 2. Dado $b \in \mathbb{R}^n$ cualquiera, el cálculo de $H(v)b$ se puede efectuar como sigue:

$$H(v)b = (I - \beta w w^T)b = b - \beta w(w^T b) = b - \beta(w^T b)w,$$

es decir:

$$\begin{cases} q = w^T b \in \mathbb{R}, \\ p = \beta q \in \mathbb{R}, \\ b - pw \in \mathbb{R}^n, \end{cases}$$

con un coste de $2n + 1$ multiplicaciones y $2n - 1$ sumas.

2. Factorización A=QR

La interpretación matricial del método de Householder conduce a la remarcable factorización $A = QR$.

Teorema (existencia y unicidad de la factorización $A = QR$)[2]
Dada $A \in \mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{R})$, existen una matriz ortogonal Q y una matriz triangular superior R tales que:

$$A = QR.$$

Además, es posible obtener todos los elementos diagonales de R mayores o iguales que cero. Si A es invertible, la factorización $A = QR$, con los elementos diagonales de R mayores que cero, es única.

[2] P. G. Ciarlet. *Introduction to numerical linear algebra and optimisation.* Cambridge University Press,1989, pp. 155-156

Efectivamente, después de $n-1$ etapas del *procedimiento de eliminación de Householder:*

$$H_{n-1}\cdots H_1 A = R,$$

así que despejando A en la anterior ecuación se deduce:

$$A = (H_{n-1}\cdots H_1)^{-1}R = H_1\cdots H_{n-1}R,$$

gracias a la propiedad 1.1.1.2. Por lo tanto:

$$A = QR,$$

siendo la nueva matriz $Q = H_1\cdots H_{n-1}$ ortogonal, por ser producto de matrices ortogonales.

Supongamos el sistema lineal:

$$Au = b,\ A \in \mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{R}) \text{ invertible.}$$

Si se dispone de la *factorización* $A = QR$ entonces:

$$A \text{ no singular } \iff R \text{ no singular }.$$

Además, puesto que Q es no singular:

$$Au = b \iff QRu = b \iff \begin{cases} Qv = b, \\ Ru = v. \end{cases}$$

Dado que no es fácil obtener explícitamente la matriz $Q = H_1 \cdots H_{n-1}$, se despeja v en la primera ecuación y se resuelve:

$$Ru = Q^T b = H_{n-1} \cdots H_1 b = \hat{b}.$$

Por tanto, para resover el sistema efectuaremos:

- Un **procedimiento de eliminación** que, en $n-1$ etapas, permite obtener R y los elementos que definen las matrices $H_1, \ldots, H_{n-1}$.
- La modificación del término independiente b para obtener $\hat{b}$.
- La **resolución del sistema triangular superior** resultante, $Ru = \hat{b}$, por **remonte.**