Factorización QR vía reflexiones.

<u>Def</u>: $H \in \mathbb{R}^{n\times n}$ es una matriz de Householder si $\exists\, u \in \mathbb{R}^n$, $\|u\|_2 = 1$, tal que

$$H = I - 2uu^t$$

<u>obs</u>: si el vector u no tiene norma 1 entonces podemos definir $H = I - 2\dfrac{uu^t}{u^t u}$

Como $u^t u = \|u\|_2^2 \Rightarrow H = I - 2\dfrac{uu^t}{\|u\|_2^2} = I - 2\dfrac{u}{\|u\|_2}\dfrac{u^t}{\|u\|_2}$

Nuestro objetivo será utilizar matrices de Householder para triangular una matriz de la siguiente forma

$$A = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ * & * & \cdots & * \end{pmatrix} \xrightarrow{H_1 A} \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix} \xrightarrow{H_2 H_1 A} \begin{pmatrix} * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & & \vdots \\ \vdots & 0 & * & & \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix} \xrightarrow{H_{n-1}\cdots H_1 A} \cdots \rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & * & & \vdots \\ \vdots & 0 & * & \\ 0 & 0 & \cdots 0 & * \end{pmatrix}}_{\text{triang. superior}}$$

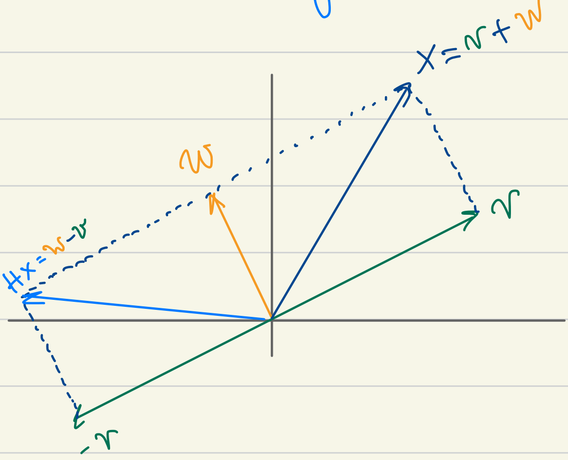
Veamos primero qué representa la transformación realizada por la matriz H.

Consideremos un vector $x \in \mathbb{R}^n$ escrito como suma de dos vectores ortogonales v y w: $x = v + w$ donde $v \perp w$ $(v^t w = 0)$

y $u = \frac{v}{\|v\|_2}$ (es decir, $v = \alpha u$ con $\|u\|_2 = 1$)

el vector u define a H: $I - 2uu^t$

Veamos gráficamente en $\mathbb{R}^2$ el efecto de H



$$Hx = (I - 2uu^t)\,x =$$
$$= (I - 2uu^t)(v + w) =$$
$$= v + w - 2uu^t v - 2u\underbrace{u^t w}_{0}$$
$$= v + w - 2uu^t \alpha u =$$
$$= v + w - 2\alpha u \underbrace{u^t u}_{\|u\|_2^2 = 1}$$
$$= v + w - 2v = w - v$$

$$\boxed{H(v + w) = w - v}$$

$\Rightarrow$ x es reflejado respecto de w

<u>observar:</u> $Hu = (I - 2uu^t)\,u = u - 2u\underbrace{u^t u}_{\|u\|_2^2 = 1} =$

$= u - 2u = -u$

$\Rightarrow$ u reflejado respecto de w es $-u$

$Hw = (I - 2uu^t)\,w = w - 2u\underbrace{u^t w}_{0} = w$

$\Rightarrow$ w corresponde al eje de reflexión

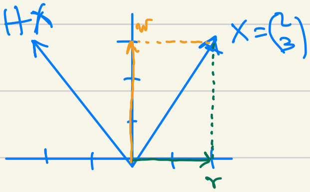
luego, $Hw = w$

<u>Ejemplo:</u> sea $x = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ escrito como comb. lineal de los vectores canónicos en $\mathbb{R}^2$

$x = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}}_{v} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 3 \end{pmatrix}}_{w}$ $\qquad x = v + w \qquad v \perp w \qquad u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

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



vimos que $Hx = w - v = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 3 \end{pmatrix}$

$\underbrace{\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{H}\underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}}_{x} = \underbrace{\begin{pmatrix} -2 \\ 3 \end{pmatrix}}_{w-v}$ $\longrightarrow$ x es reflejado respecto de $\begin{pmatrix} 0 \\ 3 \end{pmatrix} = w$

Si consideramos $u=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ entonces esperamos que x se refleje respecto a una dirección w ortogonal al $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ (es decir, se refleje respecto al eje de las abscisas)

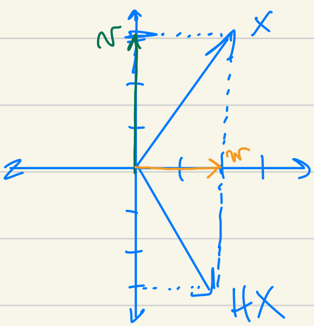
En efecto, $x = \begin{pmatrix}2\\3\end{pmatrix} = v + w = \begin{pmatrix}0\\3\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}2\\0\end{pmatrix}$

donde $u = \dfrac{v}{\|v\|_2} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ $\Rightarrow H = I - 2uu^T = \begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\end{pmatrix}$

$$= \begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}$$

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

$\Rightarrow Hx = w - v = \begin{pmatrix}2\\0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0\\3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}2\\-3\end{pmatrix}$



$\rightarrow$ x se refleja respecto al $\begin{pmatrix}2\\0\end{pmatrix}$

Veamos algunas propiedades de $H = I - 2uu^t$

- H es simétrica: $H^t = (I - 2uu^t)^t = I^t - 2(uu^t)^t$
$$= I - 2(u^t)^t u^t = I - 2uu^t = H \checkmark$$

- H es ortogonal: $H^t H = I$

$$H^t H = HH = (I - 2uu^t)(I - 2uu^t) =$$
$$= I - 2uu^t - 2uu^t + 4u \underbrace{u^t u}_{\|u\|_2^2 = 1} u^t =$$
$$= I - 4uu^t + 4uu^t = I \checkmark$$

Además recordemos que H por ser ortogonal no modifica la norma 2 de los vectores:

$$\| Hx \|_2 = \| x \|_2 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Triangularización con reflexiones.

En un primer paso de triangulación buscamos poner ceros debajo de la posición $(1,1)$ de una matriz A

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A = (a_1 | a_2 | \dots | a_n)$ a_i columna i de A..

$$\Rightarrow HA = H(a_1 | a_2 | \dots | a_n) = (Ha_1 | Ha_2 | \dots | Ha_n)$$

$$= \left(\begin{array}{c|c|c|c} * & * & & * \\ 0 & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \\ 0 & * & & * \end{array} \right)$$

$\Rightarrow$ Buscamos reflexión tal que: $a_1 \xrightarrow{H} \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$

¿Sabemos cuánto debería valer "$*$"?

H es ortogonal $\Rightarrow$ no cambia la norma de a_1

Si $* = \|a_1\| \Rightarrow \left\| \begin{pmatrix} \|a_1\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2 = \sqrt{\|a_1\|_2^2 + 0^2 + \dots + 0^2} = \|a_1\|_2$

$\Rightarrow \|Ha_1\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} \|a_1\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2$ ✓

Buscamos H tal que $Hx = \left\| \begin{pmatrix} \|x\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2 = \|x\|_2 e_1$

Llamemos por ahora $y = \|x\|_2 e_1$

x e y cumplen $\|x\|_2 = \|y\|_2$

Observemos que $x = \frac{x+x}{2} = \frac{x+y+x-y}{2}$

$\Rightarrow x = \frac{x+y}{2} + \frac{x-y}{2}$

Consideremos $w = \frac{x+y}{2}$ y $v = \frac{x-y}{2}$

Veamos que $w \perp v$: $w^t v = \left(\frac{x+y}{2}\right)^t \left(\frac{x-y}{2}\right) =$

$$= \frac{1}{2}\Big(\underbrace{x^t x}_{\|x\|_2^2} - x^t y + y^t x - \underbrace{y^t y}_{\|y\|_2^2}\Big) \overset{x^t y = y^t x}{=} \frac{1}{2}\left(\|x\|_2^2 - \|y\|_2^2\right) \underset{\|x\|_2 = \|y\|_2}{=} 0$$

$\Rightarrow$ v y w son ortogonales!

Recordemos que $H = I - 2uu^t$ con $u = \frac{v}{\|v\|_2}$

Además probamos que $\underline{Hx = H(w+v) = w - v}$

en nuestro caso $w - v = \frac{x+y}{2} - \left(\frac{x-y}{2}\right) = \frac{2y}{2} = y$

$\Rightarrow \boxed{Hx = y}$

Observar que esto funciona para un y cualquiera que cumpla $\|y\|_2 = \|x\|_2$

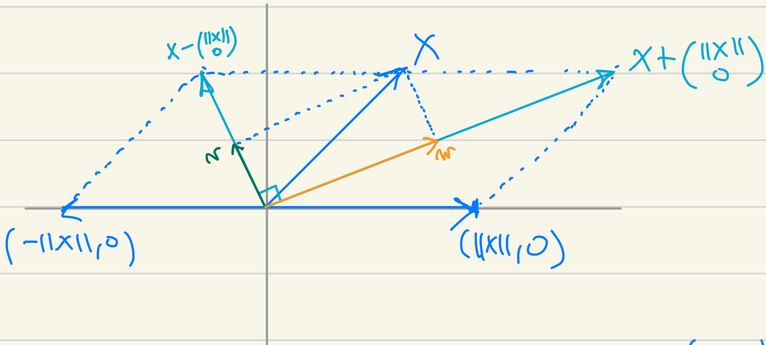
$\Rightarrow$ si nuestro $x = a_1$, $y = \begin{pmatrix} \|x\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$

se cumple que $\boxed{H a_1 = \begin{pmatrix} \|x\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}}$ como queríamos

definiendo $v = \frac{x-y}{2} \Rightarrow u = \frac{\frac{x-y}{2}}{\left\|\frac{x-y}{2}\right\|_2} =$

$$\boxed{u = \frac{x-y}{\|x-y\|_2} \quad \text{y} \quad H = I - 2uu^t}$$

Veamos esta reflexión gráficamente en $\mathbb{R}^2$



$$v = \frac{x-y}{2} = \frac{x-\begin{pmatrix}\|x\|\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}}{2}$$

$$w = \frac{x+y}{2} = \frac{x+\begin{pmatrix}\|x\|\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}}{2}$$

$$Hx = H(v+w) = w-v = y = \begin{pmatrix}\|x\|\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}$$

El vector v (normalizado) es el que define a la matriz de Householder ($H = I - 2uu^t$ $u = \frac{v}{\|v\|_2}$)

H refleja a x respecto de una dirección w (que es ortogonal a v)

Podríamos haber considerado otra elección de v y w:

$$x = \underbrace{\frac{x+y}{2}}_{v} + \underbrace{\frac{x-y}{2}}_{w} = v + w$$

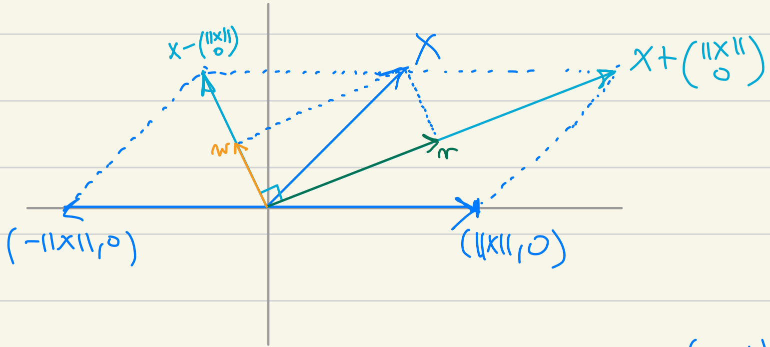
$$\boxed{\begin{array}{l}\underline{\text{antes:}}\\ w = \frac{x+y}{2}\\ v = \frac{x-y}{2}\end{array}}$$

Con esta nueva elección se sigue cumpliendo que $w \perp v$

$$\Rightarrow Hx = H(v+w) = w - v = \frac{x-y}{2} - \frac{x+y}{2} = -y$$

Con esta elección diferente la reflexión es:

de $a_1 \xrightarrow{H} \begin{pmatrix} -\|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ respecto de la dirección $w = \frac{x-y}{2}$



$$v = \frac{x+y}{2} = \frac{x + \begin{pmatrix}\|x\|\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}}{2}$$

$$w = \frac{x-y}{2} = \frac{x - \begin{pmatrix}\|x\|\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}}{2}$$

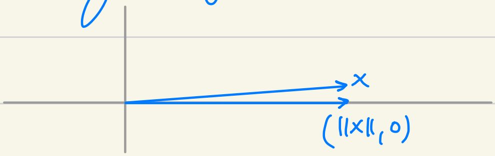
$$Hx = H(v+w) = w - v = y = \begin{pmatrix}-\|x\|\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix}$$

¿Cuál de las dos elecciones de v y w conviene?

¿$v = x + \|x\| e_1$ o $v = x - \|x\| e_1$?

Numéricamente es más estable la que no produce cancelación catastrófica, que puede ocurrir cuando $x \approx \|x\| e_1$ y los restamos.

Gráficamente:



$x \approx (\|x\|, 0)$

En este caso conviene elegir $v = x + \|x\| e_1$

En general, se utiliza $v = x + \text{signo}(x_1) \|x\| e_1$

para que no se produzca cancel. catastróf.

Veamos un ejemplo de QR en $\mathbb{R}^{2\times 2}$ usando reflexiones de Householder.

Ejemplo: sea $A = \begin{pmatrix} 1/2 & 1 \\ \sqrt{3}/2 & 0 \end{pmatrix}$

Queremos triangularla para llevarla a una matriz R triangular superior.

$\Rightarrow$ Buscamos H / $HA = \left[H\begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \middle| H\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} * & * \\ 0 & * \end{pmatrix}$

$\Rightarrow H\begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix}$ con $* = \left\| \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \right\|_2 = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{3}{4}} = 1$

Usando lo definido en ⭐

$u = \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$ $\quad H = I - 2uu^T$ $\quad$ (Notar que $\|u\|_2 = 1$)

$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix} 1/4 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 3/2 \end{pmatrix}$ $\hookrightarrow$

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 3/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}$$

Verifiquemos:

$$H\begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/4 + 3/4 \\ 3/4 - \sqrt{3}/4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Además $H\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow HA = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \Rightarrow A = H^{-1}\begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}$$

Recordemos que H es ortogonal y simétrica

$\Rightarrow H^{-1} = H$

$$\Rightarrow A = \begin{pmatrix} 1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 0 & \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} = QR$$

$\#$

¿Cómo calculamos $A=QR$ usando reflexiones cuando tenemos matrices de mayor dimensión?

Similar a como hicimos con Schur paso a paso.

El primer paso para triangular la primera columna de A ya lo sabemos hacer:

$$H_1 A = \left(\begin{array}{c|ccc} * & * & \cdots & * \\ \hline 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{array}\right) \longrightarrow A_1$$

Para este primer paso construimos una H_1

que refleje: $$H_1 \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

tomando $u = \begin{pmatrix} a_{11} - * \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix}$ $\quad H_1 = I - \dfrac{2uu^t}{u^t u}$

$$* = \left\| \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix} \right\|_2$$

$$H_1 A = \left(\begin{array}{c|ccc} * & * & \cdots & * \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & A_1 & \\ 0 & & & \end{array}\right) \qquad A_1 \in \mathbb{R}^{n-1 \times n-1}$$

Para el segundo paso volvemos a realizar lo mismo sobre A_1. Es decir, considero A_1 y $\tilde{H}_2$ / $\tilde{H}_2 A_1 = \underbrace{\begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix}}_{\in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}}$

Definimos $H_2 = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{H}_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right)$

$$\Rightarrow H_2(H_1 A) = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{H}_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|ccc} * & * & \cdots & * \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & A_1 & \\ 0 & & & \end{array}\right) =$$

$$= \left(\begin{array}{c|ccc} * & * & \cdots & * \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{H}_2 A_1 & \\ 0 & & & \end{array}\right) = \begin{pmatrix} * & \cdots & & * \\ 0 & * & & \vdots \\ \vdots & 0 & * & \vdots \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix}$$

De esta forma continuamos

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & & & \\ & \ddots & & 0 \\ & & 1 & \\ \hline & 0 & & \boxed{\tilde{H}_{n-1}} \end{array}\right) \cdots \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \\ \hline 0 & & \tilde{H}_3 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \cdots 0 \\ \hline 0 & \\ \vdots & \tilde{H}_2 \\ 0 & \end{array}\right) H_1 A = \underbrace{\begin{pmatrix} * & \cdots & * \\ 0 & * & \vdots \\ \vdots & \ddots & \\ 0 & \cdots 0 & * \end{pmatrix}}_{\substack{R \\ \text{triang. sup.}}}$$

$$\Rightarrow \quad H_{n-1} \cdots H_2 H_1 A = R$$

$$A = \underbrace{H_1^t H_2^t \cdots H_{n-1}^t}_{Q} R = QR$$

¿Cómo resolvemos un sistema conociendo la fact. QR?

$$Ax = b \Rightarrow Q\underbrace{Rx}_{y} = b \quad \begin{cases} Qy = b \xrightarrow{\text{fácil!!}} y = Q^t b \\ Rx = y \end{cases}$$

↳ triang. sup. resuelvo con sustitución hacia atrás.

Teorema: Sea $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, no singular. Entonces existen únicas $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ortogonal y $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ triangular superior con $r_{ii} > 0$ tal que $A = QR$.

dem La existencia ya la demostramos por construcción usando Householder.
Veamos unicidad.
Supongamos existen dos factorizaciones
$A = Q_1 R_1 = Q_2 R_2$ (todas inversibles!)

$$\Rightarrow \quad \underbrace{R_1 R_2^{-1}}_{t.\ sup.} = \underbrace{Q_1^t Q_2}_{ortog.}$$

Usemos el siguiente lema:

Lema Si $B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ es triangular y ortogonal entonces es diagonal (con ± 1 en la diagonal).

(La demo del lema la dejamos como ejercicio para el lector!)

Luego, usando el lema: $R_1 R_2^{-1} = Q_1^t Q_2 = D$

con $D = \begin{pmatrix} \pm 1 & & \\ & \ddots & \\ & & \pm 1 \end{pmatrix}$ diagonal.

$$\Rightarrow \quad R_1 = \begin{pmatrix} \pm 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \pm 1 \end{pmatrix} R_2$$

pero ambas $(R_2)_{ii} > 0$ y $(R_1)_{ii} > 0$

$\Rightarrow D = I \quad \Rightarrow R_1 = R_2$ y $Q_1 = Q_2$

$\#$