Algoritmo QR

Este método determina todos os autovalores de uma matriz, sem determinar o polinômio característico.

Seja A uma matriz quadrada de ordem n. O método consiste em construir uma sequência de matrizes $\{A_k\}$ obtida recursivamente.

Algoritmo QR:

Iteração 0: Faça $A_0 = A$ e obtenha a decomposição QR de A_0. Isto é, obtenha uma matriz Q_1 ortogonal e uma matriz R_1 triangular superior:

$$A_0 = Q_1 R_1$$

Iteração 1: Faça $A_1 = R_1 Q_1$ e obtenha a decomposição QR de A_1. Isto é, obtenha uma matriz Q_2 ortogonal e uma matriz R_2 triangular superior:

$$A_1 = Q_2 R_2$$

Iteração k: Faça $A_k = R_k Q_k$ e obtenha a decomposição QR de A_k. Isto é, obtenha uma matriz Q_k ortogonal e uma matriz R_k triangular superior:

$$A_k = Q_{k+1} R_{k+1}$$

Decomposição QR

Definição: Seja A uma matriz de ordem n. Então, a decomposição QR, também conhecida como fatoração QR, de A é a decomposição de A num produto de uma matriz ortogonal Q e uma matriz triangular superior R, isto é:

$$A = QR$$

OBS: A decomposição QR de uma matriz é única.

Exemplo: Seja

$$A = \begin{bmatrix} 12 & -51 & 4 \\ 6 & 167 & -68 \\ -4 & 24 & -41 \end{bmatrix}.$$

Desde que

$$A = \begin{bmatrix} 6/7 & -69/175 & 58/175 \\ 3/7 & 158/175 & -6/175 \\ -2/7 & 6/35 & 33/35 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 14 & 21 & -14 \\ 0 & 175 & -70 \\ 0 & 0 & -35 \end{bmatrix}.$$

e

$$\begin{bmatrix} 6/7 & -69/175 & 58/175 \\ 3/7 & 158/175 & -6/175 \\ -2/7 & 6/35 & 33/35 \end{bmatrix} \quad \text{é uma matriz ortogonal.}$$

Então esta é a decomposição QR de A.

Como obter a decomposição QR

Embora, a decomposição QR de uma matriz é única, existem vários métodos para obter esta decomposição QR, entre eles temos:

- Ortogonalização de Gram-Schmidt;
- Ortogonalização de Gram-Schmidt Modificado;
- Método de Householder.

Cada uma destes tem uma série de vantagens e desvantagens.

Ortogonalização de Gram-Schmidt

A Ortogonalização de Gram-Schmidt gera uma base ortogonal a partir de uma base qualquer de vetores.

Este processo será aplicado às colunas de uma matriz A, com $\det(A) \neq 0$.

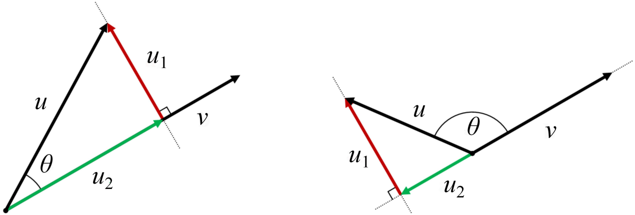
Denotemos a $j-$ésima coluna de A por $A(:,j)$, isto é

$$A = \begin{bmatrix} A(:,1) & A(:,2) & \dots & A(:,n) \end{bmatrix}$$

Definição: Sejam u e $v \in \mathbb{R}^n$. Então a projeção ortogonal de u sobre a reta que contém o vetor v, denotada por $\mathrm{proj}_v u$, é da forma:

$$\mathrm{proj}_v u = \frac{v^T u}{v^T v} v$$

OBS: A projeção de u sobre v, também é conhecida como a componente de u na direção de v.



Ou seja, nas figuras temos que

$$\mathrm{proj}_v u = u_2 \quad \text{e} \quad \cos(\theta) = \frac{u^T v}{\|u\| \|v\|}$$

Exemplo: sejam os vetores $v = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix}$ e $u = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}$. Então

- $$\text{proj}_v u = \frac{\begin{bmatrix} 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix} = \frac{19}{41} \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{76}{41} \\ \frac{95}{41} \end{bmatrix}$$
- $$\text{proj}_u v = \frac{\begin{bmatrix} 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \frac{19}{10} \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{19}{10} \\ \frac{57}{10} \end{bmatrix}$$

Algoritmo GS: Dada uma matriz A, com $\det(A) \neq 0$, faça:

$$
\begin{aligned}
u_1 &= A(:,1), & w_1 &= \frac{u_1}{\|u_1\|} \\
u_2 &= A(:,2) - \mathrm{proj}_{w_1} A(:,2), & w_2 &= \frac{u_2}{\|u_2\|} \\
u_3 &= A(:,3) - \mathrm{proj}_{w_1} A(:,3) - \mathrm{proj}_{w_2} A(:,3), & w_3 &= \frac{u_3}{\|u_3\|} \\
&\vdots & &\vdots \\
u_k &= A(:,k) - \sum_{j=1}^{k-1} \mathrm{proj}_{w_j} A(:,k), & w_k &= \frac{u_k}{\|u_k\|} \\
&\vdots & &\vdots \\
u_n &= A(:,n) - \sum_{j=1}^{n-1} \mathrm{proj}_{w_j} A(:,n), & w_n &= \frac{u_n}{\|u_n\|}
\end{aligned}
$$

OBS:

- A sequência $u_1, \ldots, u_k$ é um conjunto de vetores ortogonais, porém eles não são, necessariamente, ortonormais;
- A sequência $w_1, \ldots, w_k$ formam um conjunto de vetores ortonormais.

Mais ainda, do Algoritmo de Gram-Schmidt, temos que:

$$u_k = A(:,k) - \sum_{j=1}^{k-1} \mathrm{proj}_{w_j} A(:,k), \qquad \text{e} \qquad w_k = \frac{u_k}{\|u_k\|}$$

para $k = 1, \ldots, n$. Logo,

$$w_k^T u_k = w_k^T A(:,k) - \sum_{j=1}^{k-1} w_k^T \mathrm{proj}_{w_j} A(:,k),$$

No entanto, para $j = 1, 2, \ldots, k-1$ temos que

$$w_k^T \mathrm{proj}_{w_j} A(:,k) = w_k^T \tfrac{\langle w_j, A(:,k)\rangle}{\|w_j\|^2} w_j = \langle w_j, A(:,k)\rangle \underbrace{w_k^T w_j}_{\text{ortogonais}} = 0$$

$$\text{e} \quad w_k^T u_k = \tfrac{u_k}{\|u_k\|}^T u_k = \|u_k\|$$

Assim,

$$\|u_k\| = w_k^T A(:,k), \qquad \text{para todo} \quad k.$$

Assim, as colunas de A, $A(:,i)$'s, podem ser escritas usando os vetores unitários w_i:

$$\begin{aligned}
A(:,1) &= w_1^T A(:,1) w_1 \\
A(:,2) &= w_1^T A(:,2) w_1 + w_2^T A(:,2) w_2 \\
A(:,3) &= w_1^T A(:,3) w_1 + w_2^T A(:,3) w_2 + w_3^T A(:,3) w_3 \\
&\vdots \\
A(:,k) &= \sum_{j=1}^{k} w_j^T A(:,k) w_j \\
&\vdots \\
A(:,n) &= \sum_{j=1}^{n} w_j^T A(:,n) w_j
\end{aligned}$$

Em formato matricial temos:

$$A = QR$$

onde

$$Q = [w_1, \cdots, w_n] \quad \text{e} \quad R = \begin{bmatrix} w_1^T A(:,1) & w_1^T A(:,2) & w_1^T A(:,3) & \ldots \\ 0 & w_2^T A(:,2) & w_2^T A(:,3) & \ldots \\ 0 & 0 & w_3^T A(:,3) & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Exemplo: Determinemos a decomposição QR de

$$A = \begin{bmatrix} 12 & -51 & 4 \\ 6 & 167 & -68 \\ -4 & 24 & -41 \end{bmatrix}$$

Usando o algoritmo acima.

Solução: Da definição de A temos que as suas colunas são:

$$A(:,1) = \begin{bmatrix} 12 \\ 6 \\ -4 \end{bmatrix}, \quad A(:,2) = \begin{bmatrix} -51 \\ 167 \\ 24 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad A(:,3) = \begin{bmatrix} 4 \\ -68 \\ -41 \end{bmatrix}$$

Assim, aplicando o algoritmo acima para este vetores temos:

$$u_1 = A(:,1) = \begin{bmatrix} 12 \\ 6 \\ -4 \end{bmatrix}, \quad w_1 = \frac{u_1}{\|u_1\|} = \begin{bmatrix} \frac{6}{7} \\ \frac{3}{7} \\ \frac{2}{7} \end{bmatrix}$$

Como

$$\text{proj}_{w_1} A(:,2) = w_1^T A(:,2) w_1 = \begin{bmatrix} 18 \\ 9 \\ -6 \end{bmatrix}$$

Então

$$u_2 = A(:,2) - \text{proj}_{w_1} A(:,2) = \begin{bmatrix} -69 \\ 158 \\ 30 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad w_2 = \frac{u_2}{\|u_2\|} = \begin{bmatrix} -\frac{69}{175} \\ \frac{158}{175} \\ \frac{6}{35} \end{bmatrix}$$

Como

$$\mathrm{proj}_{w_1} A(:,3) = w_1^T A(:,3) w_1 = \begin{bmatrix} -12 \\ -6 \\ 4 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathrm{proj}_{w_2} A(:,3) = w_2^T A(:,3) w_2 = \begin{bmatrix} \frac{138}{5} \\ -\frac{316}{5} \\ -12 \end{bmatrix}$$

Então

$$u_3 = A(:,3) - \mathrm{proj}_{w_1} A(:,3) - \mathrm{proj}_{w_2} A(:,3) = \begin{bmatrix} -\frac{58}{5} \\ \frac{6}{5} \\ -33 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad w_3 = \frac{u_3}{\|u_3\|} = \begin{bmatrix} -\frac{58}{175} \\ \frac{6}{175} \\ -\frac{33}{35} \end{bmatrix}$$

Assim,

$$Q = \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6/7 & -69/175 & -58/175 \\ 3/7 & 158/175 & 6/175 \\ -2/7 & 6/35 & -33/35 \end{bmatrix}.$$

$$R = Q^T A = \begin{bmatrix} 14 & 21 & -14 \\ 0 & 175 & -70 \\ 0 & 0 & 35 \end{bmatrix}.$$

Exercício: Determinemos a decomposição QR de

$$A = \begin{bmatrix} 25 & \frac{276}{25} & \frac{232}{25} \\ 95 & 146 & 72 \\ -10 & 6 & -33 \end{bmatrix}$$

Usando o algoritmo acima.

Bibliografia

1. Álgebra Linear e suas aplicações; Strang, G., Cengage Learning, 4° Edição, 2010.
2. Álgebra Linear; Poole, D., Thomson Learning, 2004.
3. Matrix Computations; Golub, G., Van Loan, C.F., Johns Hopkins University Press, 4° Edição, 2012.
4. Applied Numerical Linear Algebra; Demmel, J., SIAM, 1997.
5. Introduction to Applied Linear Algebra; Boyd, S., Vandenberghe, L., Cambridge University Press, 1° Edição, 2018.
6. Numerical Linear Algebra with Julia; Darve, E., Wootters, M., SIAM, 1° Edição, 2021.
7. Linear Algebra and Optimization for Machine Learning; Aggarwal, C. C., Springer, 1° Edição, 2020.
8. Algoritmos Numéricos; Campos, F.F. filho, LTC, 3 Edição, 2018.