Curso: Métodos Numéricos II Professor: Creto Augusto Vidal Semestre: 2020.1

Aula # 20

1. Objetivo: Métodos que usam transformações de similaridade.

Nesta Aula, vamos apresentar um método que usa o conceito de transformação de similaridade: o Método de **Householde**r. Dois outros métodos de transformação de similaridade, o de **Jacobi** e o Método **QR**, serão apresentados nas aulas #21 e #22.

2. Transformações de Similaridade

2.1 Definição.

Dadas uma matriz **A** e uma matriz **P** que tenha uma inversa P^{-1} , podemos construir uma nova matriz a partir do **produto** dessas três matrizes e chamá-la de \overline{A} , isto é,

$$(1) \quad \overline{\mathbf{A}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}.$$

Agora suponha que conseguimos achar um par (autovalor, autovetor correspondente) da matriz \bar{A} , de maneira que a seguinte equação seja satisfeita

(2)
$$\overline{\mathbf{A}}\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$$
.

Vamos substituir A, como definido na equação (1), na equação (2). Assim temos

(3)
$$(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P})\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$$
.

Vamos multiplicar os dois lados da equação (3) pela matriz **P** e usar as propriedades associativas da multiplicação de matrizes, isto é,

(4)
$$\mathbf{P}(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P})\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{P}\mathbf{v}_i \Longrightarrow (\mathbf{P}\mathbf{P}^{-1})\mathbf{A}(\mathbf{P}\mathbf{v}_i) = \lambda_i (\mathbf{P}\mathbf{v}_i).$$

Note que, na equação (4), há dois produtos nas associações marcadas:

- (5) $PP^{-1} = I, e$
- (6) $\mathbf{P}\mathbf{v}_i = \mathbf{x}_i$,

onde o primeiro resulta na matriz identidade (veja equação (5)) e o segundo resulta em um vetor pois é um produto Matriz-Vetor. Assim, a equação (4) pode ser reescrita como

(7)
$$\mathbf{IAx}_i = \lambda_i \mathbf{x}_i \Longrightarrow \mathbf{Ax}_i = \lambda_i \mathbf{x}_i.$$

Note as relações entre as equações (2) e (7):

- 1) Em (2) nós resolvemos o problema de autovalores e autovetores da matriz \overline{A} que foi construída a partir das matrizes A e P dadas.
- 2) Porém, em (7), vemos que o autovalor encontrado em (2) também é autovalor de A.
- 3) Além disso, o autovetor \mathbf{x}_i da matriz A associado ao autovalor λ_i é obtido simplesmente multiplicando o autovetor \mathbf{v}_i de $\overline{\mathbf{A}}$ encontrado em (2) pela matriz \mathbf{P} dada, isto é, $\mathbf{P}\mathbf{v}_i = \mathbf{x}_i$ (veja equação (6)).

Nossas conclusões finais para esta subseção são:

Em uma transformação de similaridade

$$\overline{\mathbf{A}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}$$

- 1) Para qualquer valor $i=1,2,\cdots,n,\ \lambda_i$ é autovalor tanto de \overline{A} quanto de A, portanto, os espectros das duas matrizes são os mesmos, isto é, $\lambda(A) \equiv \lambda(\overline{A})$;
- 2) Os autovetores \mathbf{x}_i de A são obtidos a partir dos autovetores \mathbf{v}_i de $\overline{\mathbf{A}}$, $\mathbf{x}_i = \mathbf{P}\mathbf{v}_i$.

2.2 Escolha da matriz P.

O único inconveniente na transformação de similaridade $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{AP}$ é que temos de fornecer uma matriz \mathbf{P} que tenha inversa e, pior ainda, temos que calcular sua inversa \mathbf{P}^{-1} .

A boa notícia é que, se P for uma matriz ortogonal, então $P^{-1} = P^{T}$.

Relembrando: Uma matriz P é ortogonal se:

- 1) todas as suas colunas são vetores unitários, isto é, têm comprimentos iguais a 1, e,
- 2) todas as suas colunas são vetores ortogonais entre si, i. e., $\operatorname{col}_i(\mathbf{P}) \cdot \operatorname{col}_k(\mathbf{P}) = 0, j \neq k$

A escolha de uma matriz P ortogonal facilita a transformação de similaridade $\overline{A} = P^T A P$, mas não garante que o problema de autovalores da matriz transformada \overline{A} seja mais fácil de resolver do que o da matriz original A.

3. Métodos de Transformações de Similaridade

Nesta seção, vamos apresentar dois métodos principais e um método auxiliar que usam transformações de similaridade. O primeiro é o método de **Householder**, o segundo o de **Jacobi** e o terceiro o **QR**.

Todos os métodos têm por objetivo definir matrizes \mathbf{P} de maneira que os autovalores e autovetores da matriz transformada $\overline{\mathbf{A}}$ daquele método sejam mais fáceis de obter do que o da matriz original.

3.1 O Método de Householder.

O objetivo deste método é fazer uma sequência de transformações de similaridade até que a matriz transformada final tenha uma estrutura simples chamada matriz tridiagonal (isso acontece porque estamos lidando com matrizes **A simétricas**). Antes de discutirmos as propriedades da matriz de Householder, $P \equiv H$, vamos entender como essas matrizes vão ser aplicadas para chegar na matriz \overline{A} final.

(8)
$$\overline{\mathbf{A}} = \mathbf{H}_{n-2}^{T} \underbrace{\left(\mathbf{H}_{n-3}^{T} \cdots \underbrace{\left(\mathbf{H}_{1}^{T} \mathbf{A} \mathbf{H}_{1}\right)}_{\mathbf{Passo 1}} \mathbf{H}_{2}\right) \cdots \mathbf{H}_{n-3}}_{\mathbf{Passo (n-3)}} \mathbf{H}_{n-2}.$$

A equação (8) dá uma visão macroscópica de como o algoritmo de Householder funciona. Vamos escrever este algoritmo em alto nível e depois apresentaremos os detalhes que faltam.

3.1.1 Método de Householder em forma algorítmica

O algoritmo abaixo não se preocupa com otimização, mas sim com a clareza.

```
(MatrizSimétrica, MatrizSimétrica) metodoDeHouseholder (MatrizSimétrica A, int n)
MatrizSimétrica \mathbf{H}, \mathbf{H}_{i}, \mathbf{A}_{i}, \overline{\mathbf{A}};
// Inicializar matrizes
H ← I; // Esta matriz vai ser passada para o método de Jacobi ou QR
          // para recuperar os autovetores da matriz original.
\mathbf{A}_{i-1} \leftarrow \mathbf{A};
Para i = 1 ... (n-2) faça
          // Construção da matriz de Householder do passo i
          \mathbf{H}_{i} \leftarrow \text{matrizHouseholderBaseadaNaCol}_{i}\text{DaMatrizDoPassoAnterior}(\mathbf{A}_{i-1}, i);
          // Transformação de similaridade do passo i
          \mathbf{A}_{i} \leftarrow \mathbf{H}_{i}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}_{i-1} \mathbf{H}_{i};
          // Salvar para o próximo passo.
          \mathbf{A}_{i-1} \leftarrow \mathbf{A}_{i};
          // Acumular o produto das matrizes de Householder como \mathbf{H} \leftarrow \mathbf{I} \ \mathbf{H}_1 \mathbf{H}_2 \cdots \mathbf{H}_{n-3} \mathbf{H}_{n-2}
          H \leftarrow HH_i;
End Para
// No final do loop, a matriz A<sub>i</sub> já está no formato de uma matriz tridiagonal e já poderia ser
retornada sem a cópia abaixo.
\overline{\mathbf{A}} \leftarrow \mathbf{A}_{i};
return (\overline{A}, H);
```

Neste momento, você consegue ver que o algoritmo é a reprodução exata da equação (8). Porém, alguns pontos precisam ser esclarecidos:

- 1) Por que o loop vai de 1 até n-2?
- 2) Como é o método matrizHouseholderBaseadaNaCol_iDaMatrizDoPassoAnterior(...)?
- 3) Para que serve a matriz acumulada H?

Na subseção 3.1.2, vamos esclarecer o ponto 1). Na subseção 3.1.3, vamos esclarecer o ponto 2). Finalmente, na seção 3.1.4, vamos esclarecer o ponto 3).

3.1.2 Estrutura da matriz tridiagonal $\overline{\mathbf{A}}$

O método de Householder aplica uma sequência de transformações de similaridade para que a matriz original seja transformada em uma matriz de estrutura mais simples. A matriz tridiagonal tem a seguinte forma:

$$\overline{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix}
 a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n-2} & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\
 a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n-2} & a_{2,n-1} & a_{2,n} \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 a_{n-2,1} & a_{n-2,2} & \cdots & a_{n-2,n-2} & a_{n-2,n-1} & a_{n-2,n} \\
 a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\
 a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n-2} & a_{n,n-1} & a_{n,n}
 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}
 a_1 & b_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
 b_1 & a_2 & b_2 & \cdots & 0 & 0 \\
 0 & b_2 & a_3 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-2} & b_{n-2} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b_{n-1} & a_n
 \end{bmatrix}$$

A diagonal principal tem *n* elementos e está representada pela cor verde. As duas subdiagonais paralelas têm *n-1* elemento e estão representadas pela cor vermelha.

Note que, em todas as colunas, exceto a última, há apenas 1 elemento b abaixo do elemento da diagonal principal e, **abaixo do elemento b**, todos os elementos são 0. Portanto, para transformar a matriz original para este formato, precisamos zerar os elementos abaixo dos bs em cada coluna. Porém, abaixo dos bs só há elementos as serem zerados nas primeiras n-2 colunas. Como a matriz é simétrica, o que fizermos para as colunas acontecerá igualmente nas linhas.

Cada passo do loop tem o objetivo de deixar apenas um elemento diferente de zero abaixo do elemento da diagonal. Por isso, o loop vai da coluna 1 até a coluna n-2.

3.1.3 Constução da matriz de Householder H_i

Vamos repetir a equação (8) aqui e observar que a matriz \mathbf{H}_i atua na matriz resultante dos parênteses mais internos, ou seja, na matriz resultante dos (i-1) passos anteriores.

(8)
$$\overline{\mathbf{A}} = \mathbf{H}_{n-2}^{T} \underbrace{\left(\mathbf{H}_{n-3}^{T} \cdots \underbrace{\left(\mathbf{H}_{2}^{T} \underbrace{\left(\mathbf{H}_{1}^{T} \mathbf{A} \mathbf{H}_{1}\right)}_{\mathbf{Passo 1}} \mathbf{H}_{2}\right) \cdots \mathbf{H}_{n-3}}_{\mathbf{Passo (n-3)}} \mathbf{H}_{n-2}$$

Assim, quando aplicarmos a operação do passo i do algoritmo, isto é,

$$(10) \quad \mathbf{A}_{i} \leftarrow \mathbf{H}_{i}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}_{i-1} \mathbf{H}_{i},$$

a estrutura tridiagonal, já conseguida nas primeiras (i-1) colunas e (i-1) linhas, deve ser preservada. Para que isso aconteça, a estrutura da matriz \mathbf{H}_i é composta de quatro blocos como

(11)
$$\mathbf{H}_{\mathbf{i}} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_{\mathbf{II},\mathbf{II}} \end{bmatrix}.$$

Essa estrutura é levada em conta no método

MatrizSimétrica matrizHouseholderBaseadaNaCol_iDaMatrizDoPassoAnterior(...).

3.1.3.1 Matiz de reflexão de Householder

A matriz de Householder é uma matriz de reflexão. Isso significa que, dadas as informações de um plano (espelho) que passa pela origem do sistema de coordenadas, a matriz de Householder aplicada ao vetor posição de um ponto D produz o vetor posição do ponto D' que é a imagem do ponto D em relação ao espelho. Assim, dado o vetor unitário **n** perpendicular ao plano do espelho, a matriz de Householder é escrita como

$$\mathbf{H} = \mathbf{I} - \mathbf{2nn}^{\mathrm{T}}.$$

No nosso caso, **n** não é dado, mas calculado. Vamos ver os dois problemas possíveis que levam à construção da matriz **H**:

Problema 1. Usado em computação gráfica.

Dados o ponto D e o vetor **n** normal (perpendicular) ao espelho, construir $\mathbf{H} = \mathbf{I} - \mathbf{2nn}^{\mathrm{T}}$ para obter a imagem D' de D em relação ao espelho.

Problema 2. Nosso problema aqui.

Dado um vetor \mathbf{w} (considerado como vetor posição de algum ponto D), definimos o vetor \mathbf{w}' (considerado como vetor posição da imagem D' do ponto D com relação a um espelho) e achamos o vetor \mathbf{n} do espelho que produziria a imagem \mathbf{w}' especificada.

Vamos fazer algumas observações que nos ajudarão a resolver o problema 2.

Observação 1. O vetor paralelo ao segmento de reta que liga D' a D é perpendicular ao espelho mas não tem comprimento unitário. Esse vetor pode ser escrito como

(13)
$$\mathbf{N} = \mathbf{w} - \mathbf{w}' \Longrightarrow \mathbf{n} = \frac{\mathbf{N}}{\|\mathbf{N}\|}$$

onde

$$(14) \quad \|\mathbf{N}\| = \sqrt{\mathbf{N} \cdot \mathbf{N}}.$$

Observação 2. Como o espelho passa pela origem, a distância da origem ao ponto D e a distância da origem ao ponto D' são iguais. Isso significa que

$$(15) ||\mathbf{w}'|| = ||\mathbf{w}||.$$

Observação 3. Se pusermos a imagem D' sobre o eixo de coordenadas cujo vetor unitário é \mathbf{e}_{j} , já que a equação (19) dá o comprimento do vetor \mathbf{w}' , podemos escrever o vetor \mathbf{w}' como

(16)
$$\mathbf{w}' = \|\mathbf{w}\|\mathbf{e}_{i}.$$

Solução do Problema 2.

- 1. Calcular o comprimento de w substituindo N por w na equação (14);
- 2. Calcular w' usando a equação (16);
- 3. Calcular N e n usando as equações (13) e (14);
- 4. Construir a matriz H usando a equação (12).

Exemplo do efeito de H sobre a estrutura de uma matriz

Suponha que os dois primeiros passos do algoritmo já foram executados e a matriz obtida seja

$$A_2 = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 6 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 8 \end{bmatrix}$$

O próximo passo é construir a matriz \mathbf{H}_3 a partir das informações da coluna 3 da matriz \mathbf{A}_2 . A matriz \mathbf{H}_3 deve preservar as duas primeiras linhas e colunas e transformar a coluna 3 e a linha 3 de forma que o vetor abaixo da diagonal da coluna 3 faça o papel de \mathbf{w} . Assim

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

i) Calcular o comprimento de w substituindo N por w na equação (14)

$$\|\mathbf{w}\| = \sqrt{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}} = \sqrt{4+1} = \sqrt{5}$$

ii) Calcular w' usando a equação (16)

$$\mathbf{w} = \sqrt{5} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sqrt{5} \\ 0 \end{pmatrix}$$

iii) Calcular N e n usando as equações (13) e (14)

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2 - \sqrt{5} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 - \sqrt{5} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\|\mathbf{N}\| = \sqrt{(2 - \sqrt{5})^2 + 1}$$

$$\mathbf{n} = \frac{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2 - \sqrt{5} \\ 1 \end{pmatrix}}{\sqrt{(2 - \sqrt{5})^2 + 1}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{5}}} \\ \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{5}}} \end{pmatrix}$$

Construir a matriz **H**₃ usando a equação (12).

$$\mathbf{H}_{3} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{5}}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{5}}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{5}}} \\ \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{5}}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{5}}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{5}}} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{H}_{3} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{2}{2} \end{bmatrix}$$

Vamos aplicar essa matriz para obter a matriz

$$\mathbf{A}_3 = \mathbf{H}_3 \mathbf{A}_2 \mathbf{H}_3 = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 5 & 2.23607 & 0 \\ 0 & 0 & 2.23607 & 8.8 & -2.6 \\ 0 & 0 & 0 & -2.6 & 5.2 \end{bmatrix}.$$

Numa matriz 5 x 5, $A_3 = \overline{A}$

3.1.3.2 Mostrar que a matriz de Householder é simétrica

Se H for simétrica, ela tem de ser igual à sua transposta. Assim,

(17)
$$\mathbf{H}^{\mathrm{T}} = (\mathbf{I} - 2\mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} = (\mathbf{I})^{\mathrm{T}} - 2(\mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} = \mathbf{I} - 2(\mathbf{n}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}(\mathbf{n})^{\mathrm{T}} = \mathbf{I} - 2\mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}} = \mathbf{H}$$

3.1.3.3 Mostrar que a matriz de Householder é otogonal

Se a matriz for ortogonal sua transposta é igual à sua inversa. Porém, com $\mathbf{H}^T = \mathbf{H}$, basta mostrar que

$$H.H = I.$$

Assim,

Logo, a matriz **H** é sua própria transposta e sua própria inversa. Portanto, **H** é ortogonal.

Vamos descrever o algoritmo de construção da matriz H_i.

3.1.3.4 Algoritmo de construção da matriz de Householder

```
MatrizSimétrica metodoDeHouseholder (MatrizSimétrica A, int i)
MatrizSimétrica I;
Vetor w, w', N, n, e;
// Inicializar vetores
\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{0}; // Vetor nulo com n elementos
\mathbf{w}' \leftarrow \mathbf{0}; // Vetor nulo com n elementos
\mathbf{e} \leftarrow \mathbf{0}; // Vetor nulo com n elementos
// Copiar os elementos abaixo da diagonal da coluna i da matriz A
// para as respectivas posições no vetor w, isto é, da posição i+1 até o final.
\mathbf{w}(i+1:n) \leftarrow \mathbf{A}((i+1:n),i);
// Calcular o comprimento do vetor w
L_{\mathbf{w}} \leftarrow \|\mathbf{w}\|;
// Copiar L_w na posição i+1 do vetor \mathbf{w}'
\mathbf{w}'(\mathbf{i}+1) \leftarrow L_w;
// Calcular o vetor N
N \leftarrow w - w':
// Normalizar o vetor N
n \leftarrow \frac{\scriptscriptstyle N}{\scriptscriptstyle \|N\|};
// Montar a matriz de Householder
\mathbf{H} \leftarrow \mathbf{I} - 2\mathbf{n}\mathbf{n}^{\mathrm{T}}:
return (H);
```

Observação: Cuidado com os índices na implementação.

Tarefa #13:

Com a matriz A abaixo, faça o que se pede:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 40 & 8 & 4 & 2 & 1 \\ 8 & 30 & 12 & 6 & 2 \\ 4 & 12 & 20 & 1 & 2 \\ 2 & 6 & 1 & 25 & 4 \\ 1 & 2 & 2 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$

- 1) Implemente o método de Householder e aplique-o sobre A para encontrar
 - i. a matriz tridiagonal $\overline{\mathbf{A}}$
 - ii. a matriz acumulada $H = H_1H_2H_3$
- 3) Use os métodos da potência para encontrar os autovalores e autovetores da matriz $\overline{\mathbf{A}}$.
- 4) Usando a matriz \mathbf{H} e os autovetores da matriz $\overline{\mathbf{A}}$ encontre os autovetores da matriz \mathbf{A} .
- 5) Encontre os autovalores da matriz A.