Capítol 2

Valors i vectors propis

En tot aquest tema, tractarem l'aproximació de valors i vectors propis d'una matriu $A \in \mathbb{K}^{n\times n}$, on $\mathbb{K} = \mathbb{C}$, o $\mathbb{R}$, encara que quasi sempre considerarem el cas real. Hi ha dues classes de mètodes, **parcials** i **globals**. Els mètodes parcials calculen els valors propis amb mòdul màxim i mínim i els globals tot l'espectre. Entre els primers mètodes es troba el **mètode de la potència** i entre els segons el **mètode QR**. Pel cas en el que A és real i simètrica, es poden considerar també altres mètodes específics, com el mètode de Jacobi.

Sigui A una matriu real $n\times n$. Recordem que λ és un valor propi de A amb vector propi $v \neq 0$ si $Av = \lambda v$. Si $\lambda \in \mathbb{R}$ llavors $v \in \mathbb{R}^n$, Si $\lambda \in \mathbb{C}$, $v \in \mathbb{C}^n$ i, a més $\bar{\lambda}$ és també valor propi amb vector propi $\bar{v}$. La manera habitual de caracteritzar els valors propis és com les arrels del polinomi característic:

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I) = 0.$$

Per tant, existeixen n valors propis (comptant la multiplicitat), $\lambda_1, , \dots, \lambda_n$. Al conjunt de valors propis l'anomenen **espectre** de A, $\mathrm{Spec}(A)$. A continuació donem algunes propietats importants:

a) $\det A = \lambda_1 \cdots \lambda_n$, $\mathrm{tr}\,(A) = a_{11} + \cdots + a_{nn} = \lambda_1 + \cdots + \lambda_n$. En particular, una matriu $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ és no singular sii qualsevol valor propi real de A és diferent de zero.

b) $\mathrm{Spec}(A) = \mathrm{Spec}(A^T)$, $\rho(A) = \rho(A^T)$, $\rho(\alpha A) = |\alpha|\rho(A)$, $\rho(A^k) = [\rho(A)]^k$, $\forall\, k \in \mathbb{N}$.

c) Si A és triangular per blocs, per exemple,

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1k} \\ 0 & A_{22} & \cdots & A_{2k} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & A_{kk} \end{pmatrix},$$

llavors $\mathrm{Spec}(A) = \cup_{i=1}^k \mathrm{Spec}(A_{jj})$. En particular, si A és triangular, els valors propis de A són $a_{11}, \dots, a_{nn}$.

d) Donat un valor propi, el subspai de vectors propis és el nucli de $A - \lambda I$.

e) Donat un vector propi v (no necessàriament real) de A, aleshores el seu valor propi satisfà:

$$\lambda = \frac{\bar{v}^T A v}{\bar{v}^T v}, \qquad \text{(quocient de Rayleigh)}.$$

f) Sigui $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$ una matriu no singular. Diem que A i $C^{-1}AC$ són **similars**. Llavors $\mathrm{Spec}(A) = \mathrm{Spec}(C^{-1}AC)$, és a dir dues matrius similars tenen el mateix espectre.

En aquest capítol introduirem alguns mètodes parcials i globals. Pel cas mètode QR, haurem d'usar l'anomenada factorització QR, que ens permet resoldre sistemes lineals i el problema dels mínims quadrats. Abans, però, considerarem el problema de localització dels valor propis d'una matriu. El coneixement de la localització dels valors propis pot ser útil per accelerar la convergència d'alguns mètodes.

2.1 Localització de valors propis

Una primera estimació grollera de la localització dels valors propis d'una matriu $A \in \mathbb{K}^{n\times n}$ ens la dona la proposició 1.1.6. Tenim que si λ és valor propi llavors $|\lambda| \leq \|A\|$, on $\|\cdot\|$ és una norma induïda per una norma vectorial. És a dir, els valors propis estan continguts en el disc tancat de $\mathbb{C}$ de centre 0 i radi $\|A\|$.

Un millor resultat ens el donarà el teorema dels **cercles de Gershgorin**:

Teorema 2.1.1 *(dels cercles de Gerschgorin). Sigui A una matriu $n\times n$ amb valors propis $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Aleshores els valors propis de A estan continguts a la unió, en el pla complex, dels discs:*

$$D_i(a_{ii}, r_i) = \{z \in \mathbb{C} \;:\; |z - a_{ii}| \leq r_i\}, \qquad i = 1, \dots, n,$$

on $r_i = \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$, és a dir $\mathrm{Spec}(A) \subset \cup_{i=1}^{n} D_i(a_{ii}, r_i)$. Els conjunts $D_i(a_{ii}, r_i)$ s'anomenen cercles de Gershgorin.

Demostració:
Sigui $\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$, i sigui v un vector propi de valor propi λ. Tenim

$$(\lambda - a_{ii})v_i = \sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij}v_j, \qquad i = 1, 2, \dots, n.$$

Sigui k tal que $|v_k| = \|v\|_\infty$. Llavors:

$$|\lambda - a_{kk}|\,|v_k| \leq \sum_{j\neq k} |a_{kj}|\,|v_j|,$$

i, per tant,

$$|\lambda - a_{kk}| \leq \sum_{j\neq k} |a_{kj}| \frac{|v_j|}{|v_k|} \leq \sum_{j\neq k} |a_{kj}| = r_k.$$

D'aquí obtenim immediatament que

$$\lambda \in D_k(a_{kk}, r_k) \subset \bigcup_{i=1}^{n} D_i(a_{ii}, r_i),$$

que és el que voliem demostrar. $\square$

Nota 2.1.1 *Es dedueix de la demostració del teorema, que si sabem quina és la component k-èssima del vector propi v tal que $|v_k| = \|v\|_\infty$, podem saber en quin disc està el corresponent valor propi.*

Corol·lari 2.1.1 *Si definim $s_j = \sum_{i=1, i\neq j}^{n} |a_{ij}|$, llavors $\forall \lambda \in \mathrm{Spec}(A)$,*

$$\lambda \in \left[\bigcup_{i=1}^{n} D_i(a_{ii}, r_i)\right] \bigcap \left[\bigcup_{i=1}^{n} D_i(a_{ii}, s_i)\right].$$

Demostració:
Només cal tenir en compte que $\mathrm{Spec}(A) = \mathrm{Spec}(A^T)$, i aplicar el teorema anterior a A^T. $\square$

Hi ha una versió més precisa del teorema de Gerschgorin:

Teorema 2.1.2 *(segon teorema de Gershgorin) Si la unió de k discs de Gerschgorin és disjunta de la resta de discs, aleshores aquesta unió conté exactament k valors propis de A.*

Nota 2.1.2 *El teorema de Gerschgorin té diverses aplicacions. Per exemple, suposem que $A \in \mathbb{K}^{n\times n}$ té n vectors propis linealment independents. Considerem la matriu pertorbada $A(\epsilon) = A + \epsilon B$. Com que A és diagonalitzable, existeix una matriu C regular tal que $C^{-1}AC = D$, on D és una matriu diagonal, que conté els valors propis de A. Aleshores*

$$C^{-1}A(\epsilon)C = D + \epsilon C^{-1}BC.$$

Això vol dir que qualsevol valor propi de $A(\epsilon)$ està a una distància $O(\epsilon)$ d'un valor propi de A, com veiem si apliquem el teorema de Gerschgorin a $E(\epsilon) = C^{-1}A(\epsilon)C$, que té els mateixos valors propis que $A(\epsilon)$.

Nota 2.1.3 *Si la matriu A és simètrica, llavors C és ortogonal, i per tant les normes de C i C^{-1} estan afitades independentment de A. Això implica que el càlcul de valors propis per a matrius simètriques està ben condicionat.*

2.2 El mètode de la potència

Sigui $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ una matriu diagonalitzable (o el que és el mateix, que $\mathbb{C}^n$ té una base de vectors propis de A). Suposem que els valors propis de A satisfan:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|, \tag{2.1}$$

amb vectors propis unitaris (respecte a la norma euclidana) linealment independents $v_1, \ldots, v_n$.

El mètode de la potència serveix per aproximar el valor propi λ_1 de mòdul màxim de A (valor propi dominant).

La idea del métode és molt simple: Sigui $z^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ un vector inicial (en principi qualsevol no nul), i construïm la successió de vectors:

$$z^{(k+1)} = Az^{(k)}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots.$$

Llavors, podem escriure

$$z^{(0)} = \alpha_1 v_1 + \cdots + \alpha_n v_n,$$

i, per tant,

$$z^{(k)} = A^k z^{(0)} = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j^k \alpha_j v_j = \lambda_1^k \left[\alpha_1 v_1 + \sum_{j=2}^{n} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \alpha_j v_j \right]. \tag{2.2}$$

Ara, com que $|\lambda_j/\lambda_1| < 1$, per $j \geq 2$, la direcció del vector $z^{(k)}$ tendeix a la direcció de v_1, si $\alpha_1 \neq 0$.

A la pràctica, com que λ_1^k pot tendir a zero o divergir a infinit, quan $k \to \infty$, cal normalitzar la successió $(z^{(k)})_k$. Considerarem el següent algorisme: Partim d'un vector $z^{(0)}$ de norma euclidiana 1, (és a dir $(z^{(0)})^H z = 1$ si $z^{(0)} \in \mathbb{C}^n$ o $(z^{(0)})^T z = 1$ si $z^{(0)} \in \mathbb{R}^n$)[1] i calculem, iterativament

$$\left. \begin{array}{rcl} y^{(k+1)} & = & A z^{(k)} \\ \\ z^{(k+1)} & = & \dfrac{y^{(k+1)}}{\|y^{(k+1)}\|_2} \\ \\ \sigma_{k+1} & = & (z^{(k+1)})^H A z^{(k+1)} \end{array} \right\} \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

El següent lema ens diu que efectivament estem normalitzant la successió $(A^k z^{(0)})_{k \geq 0}$:

Lema 2.2.1 *Per a tot $k \geq 0$, $z^{(k)} = A^k z^{(0)} / \|A^k z^{(0)}\|_2$.*

Demostració:
La igualtat és obviament certa per $k = 0$. Suposem que és certa per $k-1$ amb $k \geq 1$. Llavors

$$z^{(k)} = \frac{A z^{(k-1)}}{\|A z^{(k-1)}\|_2} = \frac{A^k z^{(0)}}{\|A^{k-1} z^{(0)}\|_2} \frac{\|A^{k-1} z^{(0)}\|_2}{\|A^k z^{(0)}\|_2} = \frac{A^k z^{(0)}}{\|A^k z^{(0)}\|_2}.$$

□

Per a veure com convergeix $z^{(k)}$ a un vector propi de valor propi λ_1, estudiem el producte $v_1^H z^{(k)}$. Recordem que el teorema de Cauchy-Schwarz ens diu que donats dos vectors $x, y \in \mathbb{K}^n$, $|x^H y| \leq \|x\|_2 \|y\|_2$ i que la igualtat es produeix sii $y = \lambda x$. Per tant tenim

Proposició 2.2.1 *Sigui $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ una matriu diagonalitzable amb valors propis verificant (**??**). Siguin $y^{(0)} = \alpha_1 v_1 + \cdots + \alpha_n v_n$ i $z^{(0)} = y^{(0)} / \|y^{(0)}\|_2$, on $v_1, \ldots, v_n$ són els vectors propis associats a $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ (resp.) Suposant que $\alpha_1 \neq 0$, tenim que*

$$|v_1^H z^{(k)}| = 1 + O(|\lambda_2|^k / |\lambda_1|^k),$$

$$\sigma_k = \lambda_1 + O(|\lambda_2|^k / |\lambda_1|^k).$$

Demostració:
És dedueix del lema anterior i de l'expressió de $A^k z^{(0)}$ obtinguda en fórmula (**??**). □

Nota 2.2.1 *En la proposició anterior hi ha la hipòtesi $\alpha_1 \neq 0$, que no és possible verificarla, ja que no coneixem a priori els vectors propis de A. Però com que en la implementació de l'algorisme amb un ordinador sempre tindrem error d'arrodoniment, a la pràctica el vector $z^{(k)}$ tindrà una component no nul·la en la direcció de v_1.*

[1]Recordem que si $x \in \mathbb{C}^n$ llavors $x^H = \overline{x}^T$

Nota 2.2.2 *En el cas de que no hi hagi un valor propi dominant, hi ha diverses possibilitats. En el cas real, si tenim un valor propi dominant de multiplicitat més gran que 1, llavors la successió generada pel mètode de la potència convergeix a un vector propi de valor propi* λ_1*. Si* $\lambda_1 = -\lambda_2$ *llavors podem reduir-ho al cas anterior, usant* A^2 *en comptes de* A*. Finalment, si* $\lambda_2 = \overline{\lambda_1}$*, llavors el mètode de la potència no és convergent.*

En el cas en el que A sigui simètrica, la velocitat de convergència al valor propi augmenta sensiblement.

Proposició 2.2.2 *Si* A *és simètrica (i per tant* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$*), l'error en el valor propi obtingut via el quocient de Rayleigh, tendeix a zero com* $|\lambda_2/\lambda_1|^{2k}$*.*

Demostració:
Com que A és simètrica, existeix una base ortonormal de vectors propis $v_1, \ldots, v_n$. Sigui

$$z^{(0)} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j v_j, \qquad \|z_0\|_2 = 1.$$

Sabem que

$$y^{(k+1)} = Az^{(k)} = \frac{A^{k+1} z_0}{\|A^k z_0\|_2}.$$

Per tant, usant que la base és ortonormal, tenim

$$y^{(k+1)} = \frac{1}{\sqrt{\sum_{j=1}^{n} \lambda_j^{2k} \alpha_j^2}} \sum_{j=1}^{n} \lambda_j^{k+1} \alpha_j v_j,$$

$$z^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{\sum_{j=1}^{n} \lambda_j^{2k} \alpha_j^2}} \sum_{j=1}^{n} \lambda_j^{k} \alpha_j v_j,$$

amb el que

$$\sigma_k = (z^{(k)})^T y^{(k+1)} = \frac{1}{\sum_{j=1}^{n} \lambda_j^{2k} \alpha_j^2} \sum_{j=1}^{n} \lambda_j^{2k+1} \alpha_j^2.$$

Finalment,

$$\sigma_k = \frac{\lambda_1 + \sum_{j=2}^{n} \frac{\lambda_j^{2k+1}}{\lambda_1^{2k}} \frac{\alpha_j^2}{\alpha_1^2}}{1 + \sum_{j=2}^{n} \frac{\lambda_j^{2k}}{\lambda_1^{2k}} \frac{\alpha_j^2}{\alpha_1^2}} = \lambda_1 + O\left(\frac{\lambda_2^{2k}}{\lambda_1^{2k}}\right).$$

□

2.2.1 Mètode de la potència inversa i mètode de la potència desplaçada

Si la matriu és invertible, podem usar el mètode de la potència per a la matriu A^{-1}. D'aquesta manera obtenim el valor propi de mòdul més petit de A. En aquest cas, és habitual factoritzar la matriu $A = PLU$ i, en lloc de calcular A^{-1}, resoldre els sistemes triangulars cada cop que es vol multiplicar per A^{-1}. Aquest és el **mètode de la potència inversa.**

Una generalització és el **mètode de la potència desplaçada**. Si sabem que la matriu té un valor proper a μ, llavors apliquem el mètode de la potència inversa a la matriu $A - \mu I$.. En aquest cas, l'algorisme seria el següent:

Escollim un vector $z^{(0)}$ de norma euclidiana 1, i calculem iterativament, per $k \geq 1$:

$$\left.\begin{array}{rcl} (A-\mu I)y^{(k)} & = & z^{(k-1)} \\ \\ z^{(k)} & = & \dfrac{y^{(k)}}{\|y^{(k)}\|_2} \\ \\ \sigma_k & = & (z^{(k)})^H A z^{(k)} \end{array}\right\} \qquad k = 1, 2, \ldots$$

Aquí s'enten que per trobar $y^{(k)}$ resolem el sistema d'equacions corresponent. A més, pel càlcul de σ_k, podem usar la fórmula per A en comptes de la fórmula per $A - \mu I$, ja que els vectors propis de A i de $A - \mu I$ són els mateixos. Pel que hem vist abans, quan més pròxim sigui μ a un valor propi, més gran serà la velocitat de convergència.

2.2.2 Deflació

El mètode de la potència es pot usar per a calcular més d'un valor propi, si es té una manera de suprimir els valors propis ja calculats. Per a simplificar considerarem el cas $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Podem fer el següent:

Suposem que coneixem λ_1 valor propi real i un vector propi v_1 de valor propi λ. Veiem primer que existeix P tal que $Pv_1 = e_1$ (e_1 és el primer vector de la base canònica).

Suposem que $\|v_1\|_2 = 1$, $v_1 \neq e_1$ (si $v_1 = e_1$ aleshores $P = I$). Definim $u = v_1 - e_1$. Tenim que

$$\|u\|_2^2 = (v_1 - e_1)^T(v_1 - e_1) = v_1^T v_1 - v_1^T e_1 - e_1^T v_1 + 1 = 2(1 - v_{11}),$$

on v_{11} és la primera component de v_1. Definim

$$\mu = \frac{\sqrt{2}}{\|u\|_2}, \qquad w = \mu u.$$

Finalment, prenem $P = I - ww^T$. Veiem que

a) P és simètrica.

b) P és ortogonal (i per tant invertible).

$$P^T P = PP = (I - ww^T)(I - ww^T) = I - ww^T - ww^T + (ww^T)(ww^T) = I - 2ww^+ w(w^T w)w^T = I,$$

ja que

$$w^T w = \mu^2 u^T u = \frac{2}{\|u\|_2^2}\|u\|_2^2 = 2.$$

c) $Pv_1 = e_1$. Com que

$$w^T v_1 = \mu u^T v_1 = \mu(v_1^T - e_1^T)v_1 = \mu(1 - v_{11}),$$

llavors

$$Pv_1 = v_1 - \mu^2(1 - v_{11})u = v_1 - u = e_1.$$

Ara podem usar P per a generar una matriu $B = PAP^{-1}$ similar a A. Notem que

$$Be_1 = PAP^{-1}e_1 = PAv_1 = \lambda_1 Pv_1 = \lambda_1 e_1.$$

Això vol dir que B és de la forma

$$B = \begin{pmatrix} \lambda_1 & b^T \\ 0 & \bar{B} \end{pmatrix}.$$

Com que $\mathrm{Spec}(A) = \mathrm{Spec}(B)$, llavors $\mathrm{Spec}(A) = \{\lambda_1\} \cup \mathrm{Spec}(\bar{B})$. una vegada generada B, podem usar el mètode de la potència i deflació a la matriu $\bar{B}$ per a localitzar la resta de valors i vectors propis, sempre que tots siguin reals, simples i tinguin diferents valors absoluts.

Nota 2.2.3 *Una aplicació repetida d'aquest resultat ens permet demostrar que, quan tots els valors propis de A són reals, existeix una matriu ortogonal Q tal que $Q^\top AQ$ és triangular superior. Aquest és un cas particular de l'anomenat teorema de Schur.*

2.3 Mètode per a matrius simètriques: Rotacions de Jacobi

Donada una matriu simètrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, podem construir una successió de matrius ortogonals que al seu torn generen una successió de matrius similars a A, que té com a límit una matriu diagonal. Aquestes matrius ortogonals són les anomenades rotacions de Givens, que aquí anomenarem també rotacions de Jacobi i que es poden escriure com $J(i,k,\theta) = I - Y$, on $I \in \mathbb{R}^{n\times n}$ és la identitat $Y \in \mathbb{R}^{n\times n}$ té totes les entrades nul·les excepte $y_{ii} = y_{kk} = 1 - \cos\theta$, $y_{ik} = -\sin\theta = -y_{ki}$. És a dir

$$J(i,k,\theta) = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & 0 \\ & 1 & & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & & \\ & & & \cos\theta & & \sin\theta & & & \\ & & & & \ddots & & & & \\ & & & -\sin\theta & & \cos\theta & & & \\ & & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & & 1 & \\ 0 & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} & \begin{matrix} \\ \\ \\ i \\ \\ k \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \\ \begin{matrix} \qquad\qquad i \qquad\quad k \qquad\qquad \end{matrix} & \end{array}$$

La idea bàsica del mètode de Jacobi és: Donada $A^{(0)} = A$, per a tot $k = 1, 2, \ldots,$ calculem $A^{(k)} = (a_{ij}^{(k)})_{1\le i,j\le n}$ de la forma següent:

- Escollim un parell d'índexos p i q amb $1 \le p < q \le n$.

- Definim $A^{(k)} = J(p,q,\theta)^T A^{(k-1)} J(p,q,\theta)$, on escolllim θ tal que $a_{pq}^{(k)} = 0$.

2.3.1 Determinació de p i q:

Per a determinar els indexos p i q a cada pas donarem dos possibles mètodes:

a) **Mètode clàsic de Jacobi:** Escollim p i q tal que

$$|a_{pq}^{(k-1)}| = \max_{i \neq j} |a_{ij}^{(k-1)}|.$$

b) **Mètode cíclic de Jacobi per files:** Escollim (p, q) començant per $(1, 2)$ i avançant per files. És a dir, per a $k = 1$ escollim $(p, q) = (1, 2)$, per $k = 2$, $(p, q) = (1, 3), \ldots$ per $k = n$, $(p, q) = (1, n)$, per $k = n + 1$, $(p, q) = (2, 3)$, per $k = n + 2$, $(p, q) = (2, 4)$, per $k = 4$, $(p, q) = (2, 5)$, etc. fins a arribar a $(p, q) = (n - 1, n)$, i es repeteix cíclicament. Haurem completat un cicle quan s'hagin usat totes les posicions de la part triangular superior estricte d'una matriu $n \times n$.

2.3.2 Determinació de la transformació de Jacobi

Recordem que en el pas k hem de determinar $J(p, q, \theta)$. Si p i q ja han estat escollits, determinarem $c = \cos\theta$, $s = \sin\theta$ imposant que l'element d'índexos (p, q) s'anuli. Tenim que

$$\begin{pmatrix} a_{pp}^{(k)} & a_{pq}^{(k)} \\ a_{pq}^{(k)} & a_{qq}^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} a_{pp}^{(k-1)} & a_{pq}^{(k-1)} \\ a_{pq}^{(k-1)} & a_{qq}^{(k-1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix},$$

i volem que $a_{pq}^{(k)} = 0$. Per tant, cal que

$$0 = a_{pq}^{(k-1)}(c^2 - s^2) + (a_{pp}^{(k-1)} - a_{qq}^{(k-1)})cs. \tag{2.3}$$

Si $a_{pq}^{(k-1)} = 0$, agafem $(c, s) = (1, 0)$. Si $a_{pq}^{(k-1)} \neq 0$, siguin

$$\tau = \frac{a_{qq}^{(k-1)} - a_{pp}^{(k-1)}}{2a_{pq}^{(k-1)}}, \qquad t = \frac{s}{c},$$

és a dir que $t = \tan\theta$. Dividint l'equació (**??**) per c^2 obtenim

$$0 = a_{pq}^{(k-1)} \left(1 - \frac{s^2}{c^2}\right) + (a_{pp}^{(k-1)} - a_{qq}^{(k-1)})\frac{s}{c},$$

i per tant

$$t^2 + 2\tau t - 1 = 0.$$

És convenient agafar la més petita de les dues arrels en valor absolut, ja que llavors $|\theta| \leq \pi/4$ i si $|a_{pq}^{(k-1)}|$ és petit, aquesta eleció evita que els valors de la matriu d'índexos (p, p) i (q, q) s'intercanviin. A mès, minimitza $\|B - A\|_F$. Es pot veure que això és essencial per la convergència del mètode de Jacobi. Observem que

$$t = -\tau \pm \sqrt{1 + \tau^2}.$$

Si $\tau > 0$ l'arrel més gran és $t = -\tau - \sqrt{1 + \tau^2}$, i per tant la més petita és

$$\frac{1}{\tau + \sqrt{1 + \tau^2}} = \frac{\operatorname{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1 + \tau^2}}.$$

Si $\tau < 0$ l'arrel més gran és $-\tau + \sqrt{1+\tau^2}$ i per tant la més petita és

$$\frac{1}{\tau - \sqrt{1+\tau^2}} = \frac{\operatorname{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1+\tau^2}}.$$

Per tant, en qualsevol cas podem agafar

$$t = \frac{\operatorname{sign}(\tau)}{|\tau| + \sqrt{1+\tau^2}}, \qquad c = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}, \qquad s = tc.$$

2.3.3 Càlcul de $A^{(k)} = J(p,q,\theta)^T A^{(k-1)} J(p,q,\theta)$ i del producte de matrius de Jacobi

Després de calcular $c = \cos(\theta)$ i $s = \sin(\theta)$, podem calcular $A^{(k)}$. Observem que $A^{(k)}$ coincideix amb $A^{(k-1)}$ excepte en les files i columnes p i q. Obtenim

$$a_{pj}^{(k)} = a_{jp}^{(k)} = a_{pj}^{(k-1)} c - a_{qj}^{(k-1)} s, \qquad j = 1, \ldots, n, \quad j \neq p,\ j \neq q.$$

$$a_{qj}^{(k)} = a_{jq}^{(k)} = a_{pj}^{(k-1)} s + a_{qj}^{(k-1)} c, \qquad j = 1, \ldots, n, \quad j \neq p,\ j \neq q.$$

$$a_{pp}^{(k)} = a_{pp}^{(k-1)} c^2 - 2a_{pq}^{(k-1)} cs + a_{qq}^{(k-1)} s^2 = a_{pp}^{(k-1)} - a_{pq}^{(k-1)} t,$$

$$a_{qq}^{(k)} = a_{pp}^{(k-1)} s^2 + 2a_{pq}^{(k-1)} cs + a_{qq}^{(k-1)} c^2 = a_{qq}^{(k-1)} + a_{pq}^{(k-1)} t.$$

Les dues darreres igualtats es troben fàcilment, teneint en compte que $a_{pp}^{(k)}$ i $a_{qq}^{(k)}$ són els valors propis de la matriu

$$\begin{pmatrix} a_{pp}^{(k-1)} & a_{pq}^{(k-1)} \\ a_{pq}^{(k-1)} & a_{qq}^{(k-1)} \end{pmatrix}.$$

Siguin ara $Q_0 = I$, i $Q_k = Q_{k-1} J_k$, per $k \geq 1$, on $J_k = J(p_k, q_k, \theta_k)$ és la matriu de Jacobi tal que $A^{(k)} = J_k^T A^{(k-1)} J_k$. Llavors $A^{(k)} = Q_k^T A Q_k$ i si posem $Q_k = (q_{ij}^{(k)})_{1 \leq i,j \leq n}$ llavors per a calcular Q_k només cal actualitzar les columnes p i q corresponents de la matriu Q_{k-1} :

$$q_{ip}^{(k)} = q_{ip}^{(k-1)} c - q_{iq}^{(k-1)} s,$$

$$q_{iq}^{(k)} = q_{ip}^{(k-1)} s + q_{iq}^{(k-1)} c,$$

on $p = p_k$, $q = q_k$ i $(c, s) = (\cos\theta_k, \sin\theta_k)$.

Nota 2.3.1 *És obvi que la matriu $A^{(k)}$ és simètrica per a tot $k \geq 0$, si A és simètrica, perquè $A^{(k)} = Q_k^T A Q_k$ i Q_k és ortogonal. A més té el mateix espectre que A.*

Nota 2.3.2 *Si volem calcular $A^{(k)}$ i $Q^{(k)}$, ho podem fer simultaniament a cada pas k, tal com es dedueix de l'explicació anterior.*

2.3.4 Convergència del mètode de Jacobi

És possible demostrar la convergència dels mètodes clàssic i cíclic de Jacobi. Nosaltres només analitzarem el mètode clàssic i comentarem el cíclic.

Notem que si donada una matriu $A = (a_{ij})_{1\le i,j\le n}$ definim

$$N(A) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} a_{ij}^2},$$

que és l'arrel quadrada de la suma dels quadrats dels elements de A fora de la diagonal, si demostrem que $N(A^{(k)}) \to 0$, haurem vist que $A^{(k)}$ tendeix a ser diagonal quan $n \to \infty$. El que farem és analitzar el comportament de $N(A^{(k)})$ quan $k \to \infty$. Per això, demostrarem dues propietats de la norma de Frobenius:

Lema 2.3.1 *Si $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ és ortogonal i $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ llavors $\|QA\|_F = \|A\|_F$.*

Demostració:

Escrivim $A = (a_1, \ldots, a_n)$, on $a_i \in \mathbb{R}^n$, $i = 1, \ldots, n$. Llavors

$$QA = (Qa_1, \ldots, Qa_n).$$

Però $\|Qa_i\|_2^2 = \|a_i\|_2^2$, i per tant $\|QA\|_F = \|A\|_F$. □

Corol·lari 2.3.1 *Si Q és ortogonal i A és una matriu quadrada $\|AQ\|_F = \|A\|_F$.*

Demostració

$\|AQ\|_F = \|Q^T A^T\|_F = \|A^T\|_F = \|A\|_F$. □

Ara podem veure que per a tot $k \ge 1$, $N(A^{(k)}) < N(A^{(k-1)})$:

Lema 2.3.2 $N(A^{(k)})^2 = N(A^{(k-1)})^2 - 2a_{pq}^2$.

Demostració:

Per simplificar notació, anomenem $B = A^{(k)}$ i $A = A^{(k-1)}$. Llavors, pel lema i el corol·lari anteriors, tenim que

$$a_{pp}^2 + a_{qq}^2 + 2a_{pq}^2 = b_{pp}^2 + b_{qq}^2 + 2b_{pq}^2 = b_{pp}^2 + b_{qq}^2.$$

Per tant

$$N(B)^2 = \|B\|_F^2 - \sum_{i=1}^{n} b_{ii}^2 = \|A\|_F^2 - \sum_{i=1}^{n} a_{ii}^2 + a_{pp}^2 + a_{qq}^2 - b_{pp}^2 - b_{qq}^2 = N(A)^2 - 2a_{pq}^2,$$

que és el que voliem demostrar. □

Finalment, podem demostrar que $A^{(k)}$ tendeix a ser diagonal quan $k \to \infty$:

Proposició 2.3.1 *Si $A^{(k)} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ denota l'iterat k-èssim del mètode clàssic de Jacobi, llavors:*

$$N(A^{(k)})^2 \le \left(1 - \frac{1}{\tilde{N}}\right)^k N(A^{(0)})^2,$$

on $\tilde{N} = n(n-1)/2$.

Demostració:

Sabem que $A^{(k)} = J_k^T A^{(k-1)} J_k$, on $J_k = J(p, q, \theta)$ és la transformació de Jacobi. Com que en el mètode clàssic, $a_{pq}^{(k-1)}$ és el element de $A^{(k-1)}$ fora de la diagonal que té el valor absolut més gran,

$$N(A^{(k-1)})^2 \leq \tilde{N}((a_{pq}^{(k-1)})^2 + (a_{qp}^{(k-1)})^2) = 2\tilde{N}(a_{pq}^{(k-1)})^2.$$

Per tant,

$$2(a_{pq}^{(k-1)})^2 \geq \frac{1}{\tilde{N}} N(A^{(k-1)})^2,$$

i pel lema **??**,

$$N(A^{(k)})^2 = N(A^{(k-1)})^2 - 2(a_{pq}^{(k-1)})^2 \leq \left(1 - \frac{1}{\tilde{N}}\right) N(A^{(k-1)})^2.$$

D'aquí deduïm que

$$N(A^{(k)})^2 \leq \left(1 - \frac{1}{\tilde{N}}\right)^k N(A^{(0)})^2.$$

□

Nota 2.3.3 *Es pot demostrar*[2] *que la manera en que hem escollit l'angle assegura que que* $A^{(k)}$ *convergeix a una matriu diagonal quan* $k \to \infty$. *A més, si els valors propis de* A *són diferents, es pot demostrar que existeix* $k_0 \geq 1$ *i una constant* $c > 0$ *tal que si* $k \geq k_0$:

$$N(A^{(k+\tilde{N})}) \leq c N(A^{(k)})^2,$$

el que millora sensiblement la velocitat de convergència. També es pot demostrar que el mètode cíclic de Jacobi té el mateix tipus de convergència.

2.3.5 Sobre la implementació del mètode de Jacobi

Ambdues versions del mètode de Jacobi són fàcils d'implementar i a cada pas només cal fer de l'ordre de n operacions (sent n la dimensió de la matriu inicial), i es pot posar com a criteri de parada el que $N(A^{(k)})$ sigui més petit que una certa tolerància multiplicada per $\|A\|_F$.. El teorema de Gerschgorin ens proporcionarà una fita de l'error amb el que s'han calculat els valors propis. Ara bé, el cost de calcular el màxim dels valors absoluts dels elements de $A^{(k)}$ fora de la diagonal és molt més gran que el de càlcul de $A^{(k)}$, amb el que a la pràctica sempre s'usa el mètode cíclic de Jacobi.

Finalment, existeix una variació del mètode cíclic que el millora. A cada cicle (es a dir, quan s'han usat tots els indexos de la matriu fora de la diagonal) només s'anulen els a_{pq} que compleixen $|a_{pq}| \leq \epsilon$, on ϵ és una quantitat petita que depén del cicle.

2.4 Factorització QR

2.4.1 Introducció

En aquesta secció volem resoldre un sistema lineal usant una descomposció de la matriu diferent de la descomposició LU. Concretament, donada una matriu quadrada A, voldrem trobar Q ortogonal i

[2] veure J. H. Wilkinson: The Algebraic Eigenvalue Problem (1965).

R triangular superior tals que $A = QR$. Veurem que aquesta descomposició també es pot usar per a resoldre el problema dels mínims quadrats (sistema sobredeterminat). A més, en la darrera secció veurem que existeix un mètode associat a aquesta descomposició per a trobar valors i vectors propis.

En general sabem que al resoldre un sistema on la matriu del sistema i el terme independent només es coneixen aproximadament, podem obtenir una fita de l'error relatiu de la solució que és directament proporcional al nombre de condició de la matriu del sistema. Quan més gran és el nombre de condició, més gran és l'error relatiu de la solució. Si usem descomposició LU per a resoldre el sistema $Ax = b$, on $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i $b \in \mathbb{R}^n$, és possible que els nombres de condició de L i/o U siguin sensiblement més grans que el de A. Això vol dir que encara que A sigui ben condicionada, pot ser L i/o U siguin mal condicionades.

Una manera de minimitzar aquest problema és usar una descomposició $A = QR$, on Q és ortogonal i R és triangular superior. En tal cas, usant la norma euclidiana

$$\|A\|_2 = \|QQ^TA\|_2 \le \|Q\|_2\|Q^TA\|_2 = \|Q^TA\|_2 \le \|Q^T\|_2\|A\|_2 = \|A\|_2,$$

ja que si $x \neq 0$ $\|Qx\|_2^2 = x^TQ^TQx = x^Tx = \|x\|_2^2$, i per tant $\|Q\|_2 = 1$. Així

$$\|R\|_2 = \|Q^TA\|_2 = \|A\|_2.$$

Fent el mateix per Q^{-1} i R^{-1}, podem provar que $\kappa_2(Q) = 1$ i $\kappa_2(A) = \kappa_2(R)$, on $\kappa_2(A) = \|A\|_2\,\|A^{-1}\|_2$, és el nombre de condició respecte de la norma euclidiana d'una matriu A. Això vol dir que l'error relatiu de la solució del sistema $Ax = b$ depèn essencialment del nombre de condició de A.

En general la factorització QR d'una matriu es pot obtenir per matrius A $m \times n$, $m \ge n$. Tenim que

$$A = QR$$

on $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ és ortogonal i $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$ és triangular superior. Veurem que la factorització QR és una manera de calcular una base ortonormal per un conjunt de vectors. El càlcul de la factorització es pot fer de diverses maneres, però es basa en l'obtenció de matrius ortogonals transformin un vector concret qualsevol en un múltiple del primer vector de la base canònica. Això es pot fer amb reflexions (mitjançant refexions de Householder) o rotacions (mitjançant matrius de Givens). Nosaltres només tractarem les transformacions de Householder.

Nota 2.4.1 *En aquesta secció farem us de la següent propietat: Si $v, w \in \mathbb{R}^m$, llavors $vv^Tw = (v^Tw)v$. Notem que podem interpretar vv^Tw com el producte de matrius $v \in \mathbb{R}^{m\times 1}$, $v^T \in \mathbb{R}^{1\times m}$ i $w \in \mathbb{R}^{m\times 1}$. Per tant, $a = v^Tw \in \mathbb{R}^{1\times 1}$, i el producte de matrius va és igual a av, si identifiquem a com a matriu 1×1 amb a com a nombre real.*

2.4.2 Matrius de Householder

L'eliminació gaussiana porta a una descomposició LU on L és el producte de matrius elementals. Per construir una matriu ortogonal Q que doni una factorització QR també usarem productes de matrius elementals, anomenades matrius de Householder.

Definició 2.4.1 *Una matriu $H_v \in \mathbb{R}^{m\times m}$, s'anomena **matriu de Householder** (o reflexió o transformació) si té la forma*

$$H_v = I - \frac{2}{v^Tv}vv^T, \qquad v \neq 0,$$

*on $v \in \mathbb{R}^m$. Habitualment, prescindirem de la dependència en v, i escriurem simplement H. El vector v corresponent s'anomena **vector de Householder**.*

Observem que si $w = \lambda v$, on $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, llavors $H_v = H_w$. Si agafem $h = v/\|v\|_2$, llavors $\|h\|_2 = 1$ i

$$H = I - 2hh^T.$$

Per tant, la matriu de Householder depèn només de la direcció del vector que la defineix.

Notem que si $h = (0, \ldots, 0, h_k, \ldots, h_m)^T$ llavors

$$H = I - 2\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ h_k \\ \vdots \\ h_m \end{pmatrix}(0 \cdots 0\, h_k \cdots h_m) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & 1-2h_k^2 & -2h_kh_{k+1} & \cdots & -2h_kh_m \\ & & & -2h_kh_{k+1} & 1-2h_{k+1}^2 & \cdots & -2h_{k-1}h_m \\ & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & & & -2h_kh_m & -2h_{k+1}h_m & \cdots & 1-2h_m^2 \end{pmatrix}.$$

Proposició 2.4.1 *Sigui $H \in \mathbb{R}^{m\times m}$ una matriu de Householder. Llavors*

a) H és simètrica, és a dir $H^T = H$.

b) H és ortogonal, és a dir $H^TH = I$.

c) Si $x \in \mathbb{R}^m$ llavors $\|Hx\|_2 = \|x\|_2$.

d) H descriu una reflexió de l'espai euclidià $\mathbb{R}^m$ relatiu a l'hiperplà $H_{h,0} = \{z \in \mathbb{R}^m : \ h^Tz = 0\}$.

Demostració:
Escrivim $H = I - 2hh^T$, on $\|h\|_2 = 1$. Llavors

a) $H^T = (I - 2hh^T)^T = I - 2(hh^T)^T = I - 2hh^T = H$.

b) $H^2 = (I - 2hh^T)(I - 2hh^T) = I - 4hh^T + 4h(h^Th)h^T = I$.

c) És conseqüencia de que H sigui ortogonal.

d) És conseqüència de que $Hh = -h$, i que si agafem una base ortonormal $v_1, \ldots, v_m$, tal que $v_1 = h$, tenim que $Hv_i = v_i$, per $i > 1$.

□

Una de les propietats interessants de les matrius de Householder és que podem transformar qualsevol vector en un múltiple d'un vector de la base canònica:

Proposició 2.4.2 *Donat $x \in \mathbb{R}^m$, $x \neq 0$, existeix una matriu de Householder $H \in \mathbb{R}^{m\times m}$ tal que $Hx = \sigma e_1$, on $e_1 = (1, 0, \ldots, 0)^T$ i $\sigma = \pm\|x\|_2$. Si $H = I - \frac{2}{v^Tv}vv^T$, llavors podem agafar $v = x \pm \|x\|_2 e_1$.*

Demostració:
Cal cercar $h \in \mathbb{R}^m$, $\|h\|_2 = 1$ tal que

$$Hx = (I - 2hh^T)x = \sigma e_1,$$

per algún $\sigma \in \mathbb{R}$. En primer lloc observem que

$$\|Hx\|_2 = \|x\|_2 = \|\sigma e^1\|_2 = |\sigma|.$$

De l'equació

$$Hx = x - 2(hh^T)x = x - 2(h^T x)h = \sigma e_1,$$

deduïm que h és múltiple del vector $x - \sigma e_1$. Com que $\|h\|_2 = 1$ tenim que

$$h = \frac{x - \sigma e_1}{\|x - \sigma e_1\|_2},$$

on $\sigma \in \mathbb{R}$ satisfà $|\sigma| = \|x\|_2$. Ara cal comprovar que aquesta és la solució:

$$\|x - \sigma e_1\|_2^2 = \|x \mp \|x\|_2 e_1\|_2^2 = (x \mp \|x\|_2 e_{(1)})^T (x \mp \|x\|_2 e_(1)) = 2\|x\|_2^2 \mp 2\|x\|_2 x_1 = 2\|x\|_2[\|x\|_2 \mp x_1],$$

$$(x - \sigma e_1)^T x = x^T x - \sigma x_1 = \|x\|_2(\|x\|_2 \mp x_1).$$

Per tant,

$$2(h^T x)h = 2\frac{(x - \sigma e_1)^T x}{\|x - \sigma e_1\|_2^2}(x - \sigma e_1) = x - \sigma e_1,$$

i finalment, $Hx = x - 2(h^T x)h = \sigma e_1$, que és el que voliem. □

Càlcul del vector de Householder

La proposició anterior ens diu que els vectors de Householder tals que $Hx = \sigma e_1$ són de la forma

$$v = \lambda(x \pm \|x\|_2 e_1), \qquad \lambda \in \mathbb{R}, \quad \lambda \neq 0.$$

Notem que si $x = \mu e_1$ llavors $x - \operatorname{sign}(x_1)\|x\|_2 e_1 = 0$. Per evitar aquest problema, i també problemes de cancel·lació si x és a prop d'un múltiple de e_1, agafarem $v = \lambda(x + \operatorname{sign}(x_1)\|x\|_2 e_1)$. Notem que si $\lambda = 1$, $\|v\|_2 \geq \|x\|_2$, i per tant mai serà zero, si $x \neq 0$. A més $|v_1| = |x_1| + \|x\|_2 = \|v\|_\infty > 0$.

Moltes vegades s'agafa el vector $v = (v_1, \ldots, v_m)^T$ de tal forma que $v_1 = 1$ (si $v_1 \neq 1$ substiuïm el vector v per v/v_1). Llavors, $\|v\|_\infty \leq 1$. Si $v_1 = 1$, anomenarem a les altres components $(v_2, \ldots, v_m)$, la **part essencial** de v.

Nota 2.4.2 *Donada una matriu de Householder $H = I - 2vv^T/(v^T v)$ i un vector w tenim que $Hw = w - 2v^T wv/(v^T v)$. Per tant, per a fer aquest càlcul no cal construir la matriu H.*

De la mateixa manera, podem calcular HA, on A és una matriu qualsevol (no necesariament quadrada):

$$HA = \left(I - \frac{2}{v^T v} vv^T\right) A = A - \frac{2}{v^T v} v(A^T v)^T = A + vw^T,$$

on $w = \beta A^T v$ i $\beta = -2/(v^T v)$.

2.4.3 Factorització QR Householder

Sigui A una matriu $m \times n$ amb $m \geq n$. Volem trobar una matriu ortogonal Q $m \times m$ tal que $R = Q^T A$ sigui una matriu $m \times n$ triangular superior. Veurem la matriu Q es pot construir com el producte d'un màxim de n matrius de Householder.

Primer escrivim $A = [a_1 \cdots a_n]$, on $a_i \in \mathbb{R}^m$ són els vectors columna de la matriu A. En el primer pas, construim una matriu de Householder $H^{(1)} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ tal que $H^{(1)} a_1 = \sigma_1 e_1^{(m)}$, on $e_1^{(m)} \in \mathbb{R}^m$ és el primer vector de la base canònica. Llavors

$$H^{(1)} A = [H^{(1)} a_1 \cdots H^{(1)} a_n] = \begin{pmatrix} \sigma_1 & A_{12}^{(1)} \\ 0 & A_{22}^{(1)} \end{pmatrix},$$

on $A_{22}^{(1)}$ és una matriu $(m-1) \times (n-1)$.

Suposem ara que en el pas $k \leq n-1$ hem construit k matrius de Householder $H^{(1)}, \ldots, H^{(k)}$ tals que

$$H^{(k)} H^{(k-1)} \cdots H^{(1)} A = \begin{pmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & A_{22}^{(k)} \end{pmatrix},$$

on $A_{11}^{(k)}$ és una matriu $k \times k$ triangular superior i $A_{22}^{(k)}$ és una matriu $(m-k) \times (n-k)$. Llavors, si escrivim $A_{22}^{(k)} = [a_1^{(k)} \cdots a_{n-k}^{(k)}]$, on $a_i^{(k)} \in \mathbb{R}^{m-k}$, per tot i, podem definir

$$H^{(k+1)} = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & \tilde{H}^{(k+1)} \end{pmatrix},$$

on I_k és la matriu identitat $k \times k$ i $\tilde{H}^{(k+1)}$ és una matriu de Householder $(m-k) \times (m-k)$ tal que $\tilde{H}^{(k+1)} a_1^{(k)} = \sigma_{k+1} e_1^{(m-k)}$. Llavors

$$H^{(k+1)} H^{(k)} \cdots H^{(1)} A = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & \tilde{H}^{(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & A_{22}^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & \tilde{H}^{(k+1)} A_{22}^{(k)} \end{pmatrix}.$$

Però

$$\tilde{H}^{(k+1)} A_{22}^{(k)} = \begin{pmatrix} \sigma_{k+1} & B_{12}^{(k)} \\ 0 & B_{22}^{(k)} \end{pmatrix},$$

on $B_{22}^{(k)}$ és una matriu $(m-k-1) \times (m-k-1)$. Per tant, podem escriure

$$H^{(k+1)} H^{(k)} \cdots H^{(1)} A = \begin{pmatrix} A_{11}^{(k+1)} & A_{12}^{(k+1)} \\ 0 & A_{22}^{(k+1)} \end{pmatrix},$$

on $A_{11}^{(k+1)}$ és triangular superior i $A_{22}^{(k+1)}$ és una matriu $(m-k-1) \times (n-k-1)$.

Per tant, quan arribem a $k = n$ tindrem

$$H^{(n)} H^{(n-1)} \cdots H^{(1)} A = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

on R_1 és una matriu triangular superior $n \times n$ i $0 \in \mathbb{R}^{(m-n)\times n}$.

Finalment, la matriu ortogonal buscada és

$$Q = (H^{(n)} H^{(n-1)} \cdots H^{(1)})^T = H^{(1)} H^{(2)} \cdots H^{(n)}.$$

Nota 2.4.3 *Si la matriu A és quadrada ($m = n$) només cal usar $n-1$ matrius de Householder per a obtenir la factorització QR.*

Nota 2.4.4 *L'algorisme QR Householder requereix $2n^2(m - n/3)$ operacions elementals, si no es calcula la matriu Q explícitament, i $4(m^2n - mn^2 + n^3/3)$ operacions per calcular la Q. Si $n = m$ cal fer el doble d'operacions que per la factorització LU.*

Nota 2.4.5 *Notem que en particular hem demostrat que qualsevol matriu ortogonal $m \times m$ es pot escriure com el producte de com a màxim m matrius (reflexions) de Householder.*

Nota 2.4.6 *Per a guardar la factorització QR només cal una matriu $m \times m$. En efecte, cal guardar els vectors que generen les matrius de Householder i la matriu triangular. Siguin $v^{(j)}$, $j = 1, \dots, n$ els vectors corresponents, on la primera component val 1. La part essencial és*

$$v^{(j)} = (v^{(j)}_{j+1}, \dots, v^{(j)}_m)^T.$$

Per tant, hi ha prou espai per guardar R i Q en la mateixa matriu.

2.4.4 Propietats de la factorització QR

Els algorismes anteriors proven que la factorització QR existeix. Ara volem relacionar les columnes de Q amb $\operatorname{Im} A$ i $(\operatorname{Im} A)^\perp$ i examinar la qüestió de la unicitat.

Teorema 2.4.1 *Si $A = QR$ és una factorització QR d'una matriu $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$ de rang màxim i $A = [a_1, \dots, a_n]$ i $Q = [q_1, \dots, q_m]$ són particions en columnes de les matrius, aleshores*

$$\langle a_1, \dots, a_k\rangle = \langle q_1, \dots, q_k\rangle, \qquad k = 1, \dots, n.$$

En particular, si $Q = (Q_1\ Q_2)$ on $Q_1 \in \mathbb{R}^{m\times n}$ i $Q_2 \in \mathbb{R}^{m\times(m-n)}$ llavors

$$\operatorname{Im} A = \operatorname{Im} Q_1, \qquad (\operatorname{Im} A)^\perp = \operatorname{Im} Q_2,$$

$$A = Q_1R_1, \qquad \textit{on} \quad R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad R_1 \in \mathbb{R}^{n\times n)}, \qquad \textit{(factorització QR } \textbf{\textit{reduïda}}\textit{)}.$$

Demostració:
Comparant la columna k en els dos costats de la igualtat $A = QR$, concloem que

$$a_k = \sum_{i=1}^{k} r_{ik}q_i \subset \langle q_1, \dots, q_k\rangle,$$

i per tant $\langle a_1, \dots, a_k\rangle \subset \langle q_1, \dots, q_k\rangle$. Però com que el rang de A és màxim, això implica que $\langle a_1, \dots, a_k\rangle$ té dimensió k, i per tant $\langle a_1, \dots, a_k\rangle = \langle q_1, \dots, q_k\rangle$.

La resta del teorema és trivial, ja que per la primera part tenim que $\operatorname{Im} A = \operatorname{Im} Q_1$ i com que les columnes de Q_2 són ortogonals a $\operatorname{Im} Q_1$ també és cert que $(\operatorname{Im} A)^\perp = \operatorname{Im} Q_2$. Finalment,

$$A = (Q_1\ Q_2)\begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix} = Q_1R_1,$$

el que acaba la demostració del teorema. □

Pel següent teorema usarem un teorema sobre la factorització de Cholesky[3]

[3]veure Teorema 3.6 a A. Quarteroni et al. Numerical Mathematics

Teorema 2.4.2 *Si $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ és simètrica definida positiva, aleshores existeix un única matriu triangular inferior $G \in \mathbb{R}^{n\times n}$ amb valors positius a la diagonal tal que $A = GG^T$.*

Teorema 2.4.3 *Suposem que $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, té rang màxim per columnes. La factorització QR reduïda és única, si imposem que Q_1 tingui les columnes ortonormals i R_1 sigui triangular superior amb elements positius a la diagonal. A més, $R_1 = G^T$ on G és la matriu triangular inferior de la factorització de Cholesky de A^TA.*

Demostració:
Observem que A^TA és simètrica i definida positiva ja que

$$x^TA^TAx = (Ax)^TAx = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad Ax = 0.$$

Però com que A té rang màxim, això és equivalent a que $x = 0$. Així podem aplicar el teorema anterior i tenim que si $A = Q_1R_1$ llavors $A^TA = R_1^TR_1$, i per tant $R_1^T = G$ és el factor de Cholesky amb diagonal positiva, que és únic. Finalment, $Q_1 = AR_1^{-1}$ també és única. □

2.5 El problema dels mínims quadrats

Considerem el problema de trobar un vector $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ax = b$ on la **matriu de dades** $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ i el **vector observació** $b \in \mathbb{R}^m$ venen donats i $m \geq n$. Quan hi ha més equacions que incògnites, diem que el sistema $Ax = b$ és **sobredeterminat**. Generalment, un sistema sobredeterminat no té solució, ja que cal que $b \in \operatorname{Im} A$, que és un subespai propi de $\mathbb{R}^m$.

Això suggereix que cal minimitzar $\|Ax - b\|$ per alguna norma $\| \ \|$. El **problema de mínims quadrats** consisteix en trobar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$\|Ax - b\|_2 = \min_{z\in\mathbb{R}^n} \|Az - b\|_2.$$

És conegut que si A té rang màxim, llavors existeix una solució única $x \in \mathbb{R}^n$ d'aquest problema que és solució de les **equacions normals**

$$A^TAx = A^Tb.$$

Cal destacar que la formació de A^TA pot provocar una severa pèrdua d'informació en els càlculs amb precisió finita, i que, per tant, no és convenient calcular explícitament aquest producte de matrius, com s'observa en els següent exemple.

Exemple 2.5.1 *Sigui*

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix}.$$

Suposem que la representació en punt flotant de $1 + \epsilon^2$ és igual a 1, és a dir, $fl(1 + \epsilon^2) = 1$. Si calculem la representació en punt flotant de A^TA, obtenim

$$fl(A^TA) = \begin{pmatrix} 1 & \epsilon & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \epsilon & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

i per tant, la matriu és singular, i no podem resoldre les equacions normals.

2.5.1 Solució del problema de mínims quadrats via factorització QR

La següent proposició ens proporciona un mètode efectiu de trobar la solució del problema dels mínims quadrats. Observem que, a més, obtenim també el residu $r = \|Ax - b\|_2$.

Proposició 2.5.1 *Sigui $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ i $b \in \mathbb{R}^m$. Suposem que A és de rang màxim, i sigui $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ una matriu ortogonal tal que*

$$Q^T A = R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{array}{c} n \\ m-n \end{array}$$

és triangular superior. Si

$$Q^T b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \begin{array}{c} n \\ m-n \end{array}$$

llavors la solució $x \in \mathbb{R}^n$ del problema de mímis quadrats és única, i és solució del sistema triangular $R_1 x = c$. A més

$$\min_{z\in\mathbb{R}^n} \|Az - b\|_2 = \|d\|_2.$$

Demostració:
Observem que com que Q és ortogonal

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|Q^T Ax - Q^T b\|_2^2 = \|R_1 x - c\|_2^2 + \|d\|_2^2.$$

Com que A és de rang màxim, llavors $Ax = 0$ implica $x = 0$. Ara suposem que $R_1 x = 0$ llavors

$$Ax = Q_1 R_1 x = 0$$

i per tant $x = 0$. Això vol dir que $x = R_1^{-1} c$ és la solució única cercada. $\square$

Nota 2.5.1 *Quan $m = n$, obtenim un mètode per resoldre el sistema $Ax = b$, usant factorització QR: En aquest cas, $R = R_1$ i cal resoldre el sistema triangular $Rx = Q^T b$.*

2.5.2 La iteració QR

La factorització QR proporciona les bases per un mètode iteratiu per a calcular els valors propis d'una matriu real. Donada una matriu $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, existeix una matriu ortogonal Q i una matriu triangular superior R amb $A = QR$. Usem aquest fet per a construir una successió de matrius $(A_k)_{k\in\mathbb{N}}$ per

$$A_0 = A, \qquad A_{k+1} = R_k Q_k, \quad k \in \mathbb{N},$$

on la matriu ortogonal Q_k i la triangular superior R_k són tals que $A_k = Q_k R_k$. Es pot demostrar sota condicions adequades que aquesta successió convergeix a una matriu límit de la que es poden obtenir fàcilment els valors propis de A. El mètode en aquesta forma s'anomena **iteració QR**, i es degut a J. G. F. Francis (1961). Un mètode anàleg LR va èsser desenvolupat previament per H. Rutishauser (1958), basat en la descomposició LR (també anomenada LU) d'una matriu.

Per construcció de la successió $(A_k)_k$ tenim

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1}(Q_k R_k) Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k = Q_k^{-1} Q_{k-1}^{-1} A_{k-1} Q_{k-1} Q_k = \cdots = Q_{0k}^{-1} A_0 Q_{0k},$$

on $Q_{0k} = Q_0 Q_1 \cdots Q_k$. Això implica que A_{k+1} i $A_0 = A$ són similars, i per tant tenen els mateixos valors propis.

Nota 2.5.2 *La iteració QR mai es calcula de la manera que hem descrit. En primer lloc, es pot demostrar que donada una matriu* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *existeix una matriu ortogonal* Q*, que s'obtè com a producte de matrius de Householder, tal que* $Q^T AQ$ *és Hessenberg superior (és a dir, és una matriu que només té una subdiagonal diferent de zero). A més, quan apliquem la iteració QR a una matriu Hessenberg superior, tots els iterats són Hessenberg superior. Això vol dir que és convenient, per a minimitzar els càlculs, transformar primer la matriu original en una matriu Hessenberg superior similar. Finalment, s'usen tècniques per a accelerar la convergència de la iteració QR, anomenades tècniques de desplaçament, que es recolzen en la idea de que si* λ *és un valor propi de* A *llavors* $\lambda - \mu$ *és un valor propi de* $A - \mu I$.