1. Introducción

En este apunte deseamos resolver el problema de determinar un vector $x \in \mathbb{C}^n$ de modo que $\|Ax - b\|_2$ sea lo menor posible, siendo A un elemento de $\mathbb{C}^{m\times n}$ con $m \geq n$, de rango n.
En clase ya vimos que cualquier vector de $\mathbb{C}^m$ se puede descomponer, de manera única, en $b_1 + b_2$ con $b_1 \in \mathbb{C}^m$ igual a la proyección ortogonal de b sobre $\mathrm{im}(A)$ (espacio generado por columnas de A) y $b_2 := b - b_1$, la proyección ortogonal de b sobre $\mathrm{im}(A)^{\perp}$.
Con esta descomposición de b,

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|Ax - b_1 - b_2\|_2^2 = \langle Ax - b_1 - b_2; Ax - b_1 - b_2\rangle = \|Ax - b_1\|_2^2 + \|b_2\|_2^2, \tag{1}$$

por lo que $x \in \mathbb{C}^n$ minimiza $\|Ax - b\|_2$ si y solo si x es solución de $Ax = b_1$. Como A tiene rango n y $b_1 \in \mathrm{im}(A)$, este sistema tiene solución única.
Comentario: La igualdad (1) también se satisface si A no es una matriz de rango completo. Si A no tiene rango n, el sistema $Ax = b_1$ tiene infinitas soluciones.
En clase vimos dos modos de calcular b_1 (proyección ortogonal de b sobre $\mathrm{im}(A)$) y cómo obtener en cada caso el vector x solución de $Ax = b_1$ y solución del problema original.

1.1. Alternativa 1: Sistema de ecuaciones normales

La proyección ortogonal de b sobre $\mathrm{im}(A)$ es el vector $b_1 \in \mathbb{C}^m$ que satisface:

1. $b_1 \in \mathrm{im}(A)$,
2. $b - b_1 \in \mathrm{im}(A)^{\perp}$.

Dado que A tiene rango n, si denotamos por $a_1, a_2, \ldots, a_n \in \mathbb{C}^m$ a las columnas $1, 2, \ldots, n$ de A, entonces

$$b_1 \in \mathrm{im}(A) \;\Leftrightarrow\; \text{ existen } \alpha_1, \alpha_2, \ldots\, \alpha_n \in \mathbb{C} \text{ tales que } b_1 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i a_i.$$

Además, $b - b_1 \in \mathrm{im}(A)^{\perp}$ si y solo si para cada $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$ se cumple que

$$\langle b - b_1; a_i\rangle = 0.$$

Las n condiciones anteriores resultan en que los valores $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ que definen b_1 son la solución de

$$A^*A \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = A^*b.$$

En clase se vió que si A tiene rango n, la matriz A^*A es invertible y el sistema anterior tiene solución única.

El vector b_1, proyección ortogonal de b sobre $\text{im}(A)$ es

$$b_1 = A \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = A(A^*A)^{-1}A^*b.$$

La matriz $A(A^*A)^{-1}A^*$ es el proyector ortogonal sobre $\text{im}(A)$. La sección 4 más adelante está dedicada a proyectores. Por el momento, podemos asegurar que $P := A(A^*A)^{-1}A^*$ es proyector ortogonal sobre $\text{im}(A)$ porque

1. $P^2 = P$ (esto garantiza que P es una matriz de proyección),
2. $P^* = P$ (esto garantiza que P es proyector ortogonal),
3. $\text{im}(P) = \text{im}(A)$ (esto garantiza que P proyecta sobre $\text{im}(A)$).

Una vez que se tiene b_1, el vector x, solución a $Ax = b_1$ es

$$Ax = b_1 \Leftrightarrow Ax = A(A^*A)^{-1}Ab \Leftrightarrow x = (A^*A)A^*b \Leftrightarrow (A^*A)x = A^*b,$$

es decir, el vector x es igual a $\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}$ que es lo que esperábamos pues x es solución de $Ax = b_1$ si y solo si las componentes de x son los escalares que permiten escribir a b_1 como combinación lineal de las columnas de A y esos escalares son justamente $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$.

La siguiente alternativa de solución al problema de determinar el vector $x \in \mathbb{C}^n$ que minimiza $\|Ax - b\|_2$ es exactamente igual a la presentada en esta sección, pero en lugar de trabajar con la base $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ de la imagen de A, se construye una base ortonormal para este subespacio de $\mathbb{C}^m$.

1.2. Alternativa 2: Descomposición QR reducida de A vía proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt

Si A tiene rango n, $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ es una base de $\text{im}(A)$ y con el proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt podemos construir una base ortonormal $\{q_1, q_2, \ldots, q_n\}$ para $\text{im}(A)$. Teniendo en cuenta que para cada $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$

$$q_i = \frac{1}{\|v_i\|_2} v_i \text{ con } v_i = a_i - \sum_{j=1}^{i-1} \langle a_i; q_j \rangle q_j$$

se tiene que para cada $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$,

$$a_i = \|v_i\|_2 q_i + \sum_{j=1}^{i-1} \langle a_i; q_j \rangle q_j$$

por lo que podemos escribir

$$A = (a_1\ a_2\ \cdots\ a_i\ \cdots\ a_n) = (q_1\ q_2\ \cdots\ q_i\ \cdots\ q_n)\begin{pmatrix} \|v_1\|_2 & \langle a_2; q_1\rangle & \cdots & \langle a_i; q_1\rangle & \cdots & \langle a_n; q_1\rangle \\ 0 & \|v_2\|_2 & \cdots & \langle a_i; q_2\rangle & \cdots & \langle a_n; q_2\rangle \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \langle a_i; q_{i-1}\rangle & \cdots & \langle a_n; q_{i-1}\rangle \\ 0 & 0 & \cdots & \|v_i\|_2 & \cdots & \langle a_n; q_i\rangle \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \langle a_n; q_{i+1}\rangle \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \|v_n\|_2 \end{pmatrix}.$$

Las matrices $Q = (q_1\ q_2\ \cdots\ q_i\ \cdots\ q_n)$ y

$$R = \begin{pmatrix} \|v_1\|_2 & \langle a_2; q_1\rangle & \cdots & \langle a_i; q_1\rangle & \cdots & \langle a_n; q_1\rangle \\ 0 & \|v_2\|_2 & \cdots & \langle a_i; q_2\rangle & \cdots & \langle a_n; q_2\rangle \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \langle a_i; q_{i-1}\rangle & \cdots & \langle a_n; q_{i-1}\rangle \\ 0 & 0 & \cdots & \|v_i\|_2 & \cdots & \langle a_n; q_i\rangle \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \langle a_n; q_{i+1}\rangle \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \|v_n\|_2 \end{pmatrix}$$

forman una *descomposición QR reducida de A*. Ellas tienen las siguientes propiedades:

1. $Q \in \mathbb{C}^{m\times n}$ y sus columnas son vectores ortonormales de $\mathbb{C}^m$,
2. R es triangular superior con números positivos en diagonal principal,
3. $A = QR$.

Lo que resta de esta sección se evaluará en certamen 1, pero no lo hemos visto en clase. Las secciones 2, 3 y 4 no se preguntarán en certamen 1.
Si $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ tiene rango n, podemos construir, con el proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt, una factorización QR reducida de A.
Veamos que esta factorización es única y cómo utilizarla para determinar el vector $x \in \mathbb{C}^n$ que minimiza $\|Ax - b\|_2$.
Dado que A tiene rango n, la matriz A^*A es hermitiana y definida positiva, es decir, ella tiene una única descomposición de Cholesky. Además, si $A = QR$, entonces $A^* = R^*Q^*$ y

$$A^*A = R^*\underbrace{Q^*Q}_{=I}R = R^*R,$$

por lo que R^*R es una descomposición de Cholesky de A^*A. Ya sabemos que esta descomposición es única. Pero, ¿es posible, dada la matriz R de la descomposición de Cholesky de A^*A, encontrar varias matrices Q con las propiedades anteriores? La respuesta a esta pregunta es no, pues

$$A = QR \Leftrightarrow Q = AR^{-1},$$

por lo que, conociendo R, existe una única matriz Q con la propiedad $A = QR$.

El vector b_1 es igual a

$$b_1 = \langle b; q_1\rangle q_1 + \langle b; q_2\rangle q_2 + \ldots + \langle b; q_n\rangle q_n = \sum_{i=1}^{n} (q_i^* b)\, q_i = \left(\sum_{i=1}^{n} q_i q_i^*\right) b = QQ^* b.$$

La matriz QQ^* es el proyector ortogonal sobre $\mathrm{im}(A)$.
El vector $x \in \mathbb{C}^n$, solución a $Ax = b_1$ es tal que

$$Ax = b_1 \Leftrightarrow QRx = QQ^* b \Leftrightarrow Q(Rx - Q^* b) = \theta \Leftrightarrow Rx = Q^* b,$$

donde la última equivalencia se cumple porque las $\ker(Q) = \{\theta\}$.
La matriz R es la matriz de cambio de base, de la base $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ a la base $\{q_1, q_2, \ldots, q_n\}$.
El vector $QQ^* b$ es la proyección ortogonal de b sobre $\mathrm{im}(A)$. Sus coordenadas con respecto a $\{q_1, q_2, \ldots, q_n\}$ son las componentes del vector $Q^* b$. Al hacer $x = R^{-1}(Q^* b)$ estamos calculando las coordenadas de b_1 con respecto a la base $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ de $\mathrm{im}(A)$.
Las matrices QQ^* y $A(A^*A)^{-1}A^*$ son iguales, ambas son el proyector ortogonal sobre $\mathrm{im}(A)$. Teniendo en cuenta que $A = QR$ se tiene que

$$A(A^*A)^{-1}A^* = QR\left(R * \underbrace{Q^*Q}_{=I} R\right)^{-1} R^*Q^* = QRR^{-1}(R^*)^{-1}R^*Q^* = QQ^*.$$

El contenido a partir de acá no se evaluará en el primer certamen, si éste es hasta el 13 de mayo.
Si el conjunto $\{q_1, q_2, \ldots, q_n\}$ se extiende a una base ortonormal $\{q_1, q_2, \ldots, q_n, q_{n+1}, \ldots, q_m\}$ de $\mathbb{C}^m$, se tiene que

$$A = QR \Rightarrow A = (q_1\ q_2\ \cdots\ q_n\ q_{n+1}\ \cdots\ q_m)_{m\times m} \begin{pmatrix} R \\ \Theta \end{pmatrix}_{m\times n} = \hat{Q}_{m\times m}\hat{R}_{m\times n},$$

donde Θ es la matriz nula de $m-n$ filas y n columnas.
Este nuevo par de matrices forman una factorización QR (completa) de A.
Una *factorización QR, completa, de* $A \in C^{m\times n}$ es un par de matrices $Q \in \mathbb{C}^{m\times m}$, $R \in C^{m\times n}$ con las propiedades:

1. Q es una matriz unitaria,
2. R es de la forma
$$\begin{pmatrix} R_1 \\ \Theta \end{pmatrix},$$
donde $R_1 \in \mathbb{C}^{n\times n}$ es triangular superior (se relaja la condición de que los elementos en su diagonal principal sean reales positivos),
3. $A = QR$.

Teniendo una factorización QR reducida de A es posible construir una factorización QR, completa, de A. A pesar de que la factorización reducida es única, dado que no hay una única forma de extender una base ortonormal de $\mathrm{im}(A)$ a una base ortonormal de $\mathbb{C}^m$, la factorización QR no es única, aún si le imponemos la condición de que los elementos en diagonal principal de R_1 sean reales positivos.
Ejemplo: En la ayudantía del miércoles 23 de abril se calculó la factorización QR reducida de

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 1 & 3 & 7 \\ 1 & -1 & -4 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 \\ 0 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}.$$

Dado que

$$\operatorname{im}(A)^{\perp} = \left\langle \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} \right\rangle = \left\langle \left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\} \right\rangle,$$

las siguientes son factorizaciones QR, completas, de A,

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 \\ 0 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 \\ 0 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

2. Solución a problema de mínimos cuadrados con factorización (descomposición) QR de A

Si se tienen matrices $Q \in \mathbb{C}^{m\times m}$, unitaria, y $R \in \mathbb{C}^{m\times n}$ (con la estructura mencionada anteriormente) tales que $A = QR$, se puede determinar el vector $x \in \mathbb{C}^n$ que minimiza $\|Ax - b\|_2$ de la siguiente forma: dado que $Q = (Q_1\ Q_2)$[1] es unitaria, $Q^* = \begin{pmatrix} Q_1^* \\ Q_2^* \end{pmatrix}$ también lo es y

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2 &= \|Q^*\,(Ax - b)\,\|_2 = \|Q^*Ax - Q^*b\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} R_1 \\ \Theta \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} Q_1^*b \\ Q_2^*b \end{pmatrix} \right\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} R_1x - Q_1^*b \\ Q_2^*b \end{pmatrix} \right\|_2, \\ &= \|R_1x - Q_1^*b\|_2 + \|Q_2^*b\|_2\,. \end{aligned}$$

Por tanto, x minimiza $\|Ax - b\|_2$ si y solo si $R_1x = Q_1^*b$ (mismo resultado que obtuvimos anteriormente) y, si $x = R_1^{-1}Q_1^*b$, entonces $\|Ax - b\|_2 = \|Q_2^*b\|_2$.
En (1) obtuvimos que, si x es el vector que satisface $Ax = b_1$, entonces $\|Ax - b\|_2 = \|b_2\|_2$.
Notemos que $\|Q_2^*b\|_2 = \|b_2\|_2$, es decir, los resultados que hemos obtenido no se contradicen pues, dado que Q^* es unitaria y $Q_2Q_2^*$ es el proyector ortogonal sobre $\operatorname{im}(A)^{\perp}$,

$$\|b_2\|_2 = \|Q^*b_2\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} Q_1^* \\ Q_2^* \end{pmatrix} Q_2Q_2^*b \right\|_2 \left\| \begin{pmatrix} \theta \\ Q_2^*b \end{pmatrix} \right\|_2 = \|Q_2^*b\|_2.$$

A continuación veremos una alternativa para calcular una descomposición QR, completa, de una matriz $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ con rango completo.

3. Transformaciones de Householder

Observe la figura 1. En ella se representan los subespacios vectoriales de $\mathbb{R}^2$, $\langle\{w\}\rangle$ y su complemento ortogonal.
El vector x, también mostrado en la figura, puede descomponerse de manera única en $x = x_1 + x_2$, con $x_1 \in \langle\{w\}\rangle$ y $x_2 \in \langle\{w\}\rangle^{\perp}$. Note que $x_1 = \frac{\langle x;w\rangle}{\langle w;w\rangle}x$. Si $P := \frac{1}{w^*w}ww^*$, entonces $x_1 = Px$ y P es el proyector ortogonal sobre $\langle\{w\}\rangle$. El vector $x_2 = x - x_1$.
El vector $x_2 - x_1$, también mostrado en la figura y reflexión de x con respecto a $\langle\{w\}\rangle^{\perp}$, es entonces igual a

$$x - x_1 - x_1 = x - Px - Px = (I - 2P)x = \left(I - \frac{2}{w^*w}ww^*\right)x.$$

[1] Q_1 representa las primeras n columnas de Q y Q_2, las restantes. Los vectores en Q_1 son una base ortonormal de $\operatorname{im}(A)$ y los vectores en Q_2 son una base ortonormal de $\operatorname{im}(A)^{\perp}$.

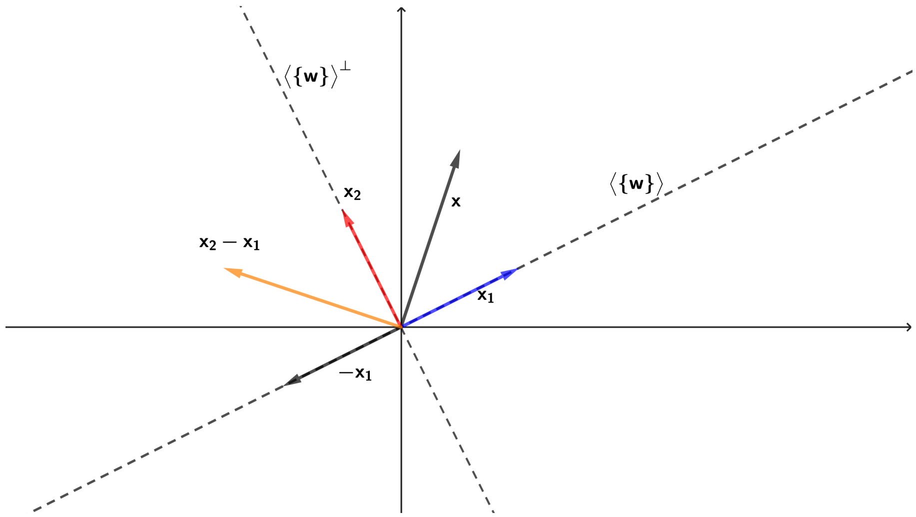

Figura 1: Reflexión con respecto a $\langle\{w\}\rangle^\perp$

Dado un vector $w \in \mathbb{C}^n - \{\theta\}$, la matriz $H_w := I - \frac{2}{w^*w} ww^*$ recibe el nombre de *matriz de Householder* asociada a w. El vector $H_w x$ es la reflexión de x con respecto a $\langle\{w\}\rangle^\perp$. Si w es tal que $\|w\|_2 = 1$, la matriz H_w se escribe como $I - 2ww^*$.
La matriz H_w satisface es hermitiana y unitaria,

$$H_w^* H_w = H_w^2 = \left(I - \frac{2}{ww^*} ww^*\right)\left(I - \frac{2}{ww^*} ww^*\right) = I.$$

La siguiente es una propiedad importante de las matrices de Householder, ella es, junto a las dos anteriores (hermitiana y unitaria), la que nos permitirá utilizarla para construir una descomposición QR completa de A: si $x, y \in \mathbb{C}^n$ son tales que

1. $x \neq y$,
2. $\|x\|_2 = \|y\|_2$,
3. $\langle x; y\rangle \in \mathbb{R}$,

entonces la matriz de Householder asociada a $w := x - y$ satisface $H_w x = y$.
Notar que x e y son distintos del nulo (si uno de los dos es el nulo, el otro tiene que serlo por la condición de que tengan la misma norma 2, pero esto contradice la condición de que sean distintos entre sí).
El vector $w = x - y$ es tal que

$$w^*w = (x-y)^*(x-y) = \|x\|_2^2 - x^*y - y^*x + \|y\|_2^2 = \underbrace{2\|x\|_2^2 - 2x^*y}_{\in\mathbb{R}} = 2x^*(x-y) = 2x^*w \in \mathbb{R}.$$

Entonces,

$$H_w x = \left(I - \frac{2}{w^*w} ww^*\right) x = x - \frac{2}{2x^*w} w(w^*x) = x - w = x - (x-y) = y.$$

Ejemplo:

Los vectores $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ e $y = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ satisfacen las condiciones mencionadas anteriormente.

La matriz de Householder asociada a $w = x - y$ es

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

y $H_w x = y$.
Sean e_1 el primer vector canónico de $\mathbb{C}^n$ y x, un vector de $\mathbb{C}^n$ que no es elemento de $\langle\{e_1\}\rangle$. Las matrices de Householder pueden utilizarse para transformar un vector $x \in \mathbb{C}^n$ en un elemento de $\langle\{e_1\}\rangle$, es decir, en un vector de la forma $\alpha\, e_1$.
Sea $y := \alpha e_1$. Para que x e y satisfagan condiciones de resultado anterior, deseamos determinar $\alpha \in \mathbb{C}$ de modo que

1. $x \neq \alpha e_1$ (esta condición se satisface independientemente del valor de α pues hemos supuesto que $x \notin \langle\{e_1\}\rangle$),
2. $\|x\|_2 = \|\alpha e_1\|_2 = |\alpha|$,
3. $\langle x; \alpha e_1\rangle = \overline{\alpha} x_1 \in \mathbb{R}$,

si x_1 denota la primera componente de x.
El número α puede ser escrito en forma polar. Como $|\alpha| = \|x\|_2$, $\alpha = \|x\|_2 e^{i\,\theta}$. Solo nos resta determinar θ para que $\overline{\alpha} x_1$ sea un número real.
Si $x_1 = 0$, α puede ser cualquier número complejo con módulo igual a $\|x\|_2$.
Si $x_1 \neq 0$, $x_1 = |x_1| e^{i\,\theta_1}$. Entonces,

$$\overline{\alpha} x_1 = \|x\|_2 |x_1| e^{i\,(\theta_1 - \theta)}$$

y es un número real si $\theta_1 - \theta = 0$ o $\theta_1 - \theta = \pi$, es decir, si $\theta = \theta_1$ o $\theta = \theta_1 - \pi$.
Con esto se tiene que

$$\alpha = \|x\|_2 e^{i\,\theta_1} \vee \alpha = \|x\|_2 e^{i\,(\theta_1 - \pi)} = \|x\|_2 e^{i\,\theta_1} e^{-i\pi} = -\|x\|_2 e^{i\,\theta_1},$$

es decir, $\alpha = \pm\|x\|_2 e^{i\,\theta_1}$ si θ_1 es argumento de x_1. El vector y es $\pm\|x\|_2 e^{i\,\theta_1} e_1$,

$$w = x - y = \begin{pmatrix} |x_1| e^{i\,\theta_1} \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \pm\|x\|_2 e^{i\,\theta_1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\,\theta_1} \left(|x_1| \mp \|x\|_2\right) \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \Rightarrow w^* w = \|w\|_2^2 = 2\|x\|_2 \left(\|x\|_2 \mp |x_1|\right).$$

La matriz

$$H_w = I - \frac{2}{w^* w} w w^* = I - \frac{2}{2\|x\|_2 \left(\|x\|_2 \mp |x_1|\right)} w w^* = I - \frac{1}{\|x\|_2 \left(\|x\|_2 \mp |x_1|\right)} w w^*$$

y

$$H_w x = \begin{pmatrix} \pm\|x\|_2 e^{i\,\theta_1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Para evitar restar cantidades similares al calcular H_w, se toma $y = -\|x\|_2 e^{i\,\theta_1}$ con lo que

$$w = \begin{pmatrix} e^{i\,\theta_1} \left(|x_1| + \|x\|_2\right) \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad H_w = I - \frac{1}{\|x\|_2 \left(\|x\|_2 + |x_1|\right)} w w^*, \quad H_w x = \begin{pmatrix} -\|x\|_2 e^{i\,\theta_1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

3.1. Caso real: $\theta_1 = (2k+1)\pi$ o $\theta_1 = 2k\pi$ con $k \in \mathbb{Z}$

Si $x_1 < 0$, $e^{i\,\theta_1}\left(|x_1| + \|x\|_2\right) = -(-x_1 + \|x\|_2) = x_1 - \|x\|_2 = x_1 + \text{signo}(x_1)\|x\|_2$.
Si $x_1 \geq 0$, $e^{i\,\theta_1}\left(|x_1| + \|x\|_2\right) = x_1 + \|x\|_2 = x_1 + \text{signo}(x_1)\|x\|_2$.
En el caso real,

$$w = \begin{pmatrix} x_1 + \text{signo}(x_1)\|x\|_2 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad H_w = I - \frac{1}{\|x\|_2\left(\|x\|_2 + |x_1|\right)} w w^*, \quad H_w x = \begin{pmatrix} -\text{signo}(x_1)\|x\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

3.2. Matrices de Householder para construir descomposición QR completa de A

Ya sabemos que, dado un vector $x \notin \langle\{e_1\}\rangle$, puede encontrarse un vector $w \in \mathbb{C}^n$ de modo que la matriz H_w satisface $H_w x \in \langle\{e_1\}\rangle$.
Supongamos que

$$A = (a_1\ a_2\ \cdots\ a_n)\,.$$

Si $a_1 \in \langle\{e_1\}\rangle$, $H_1 = I$. De lo contrario, H_1 es la matriz H_w que satisface $H_w a_1 = \alpha_1 e_1$, donde $\alpha_1 \in \mathbb{C}$ se escoge como se explicó en sección anterior.
Entonces,

$$H_1 A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & y \\ \theta & A_2 \end{pmatrix},$$

con $y \in \mathbb{C}^{1\times(n-1)}$, θ es el vector nulo de $\mathbb{C}^{n-1}$ y $A_2 \in \mathbb{C}^{(n-1)\times(n-1)}$
Supongamos que $\hat{a}_2 \in \mathbb{C}^{n-1}$ denota la primera columna de A_2. Si $\hat{a}_2 \in \langle\{e_1\}\rangle$ (ahora e_1 es el primer vector canónico de $\mathbb{C}^{n-1}$), $\hat{H}_2 = I$ (matriz identidad de orden $n-1$). De lo contrario, $\hat{H}_2$ es la matriz H_w que satisface $H_w \hat{a}_2 = \alpha_2 e_1$, donde $\alpha_2 \in \mathbb{C}$ se escoge como se explicó en sección anterior.
La matriz

$$H_2 = \begin{pmatrix} 1 & \theta \\ \theta & \hat{H}_2 \end{pmatrix}$$

es hermitiana y unitaria y

$$H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & y_1 & \hat{y} \\ 0 & \alpha_2 & z \\ \theta & \theta & A_3 \end{pmatrix},$$

donde $y = (y_1\ \hat{y})$ representa los elementos en primera fila, columnas 2 a n de $H_1 A$, $z \in \mathbb{C}^{1\times(n-2)}$ y $A_3 \in \mathbb{C}^{(n-2)\times(n-2)}$. Procediendo de esta forma se construyen matrices $H_1, H_2, \ldots, H_n$ tales que

$$H_n H_{n-1} \cdots H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} R_1 \\ \Theta \end{pmatrix}$$

con $R_1 \in \mathbb{C}^{n\times n}$ triangular superior y Θ, la matriz nula de $m-n$ filas y n columnas.
Dado que $H_n, H_{n-1}, \ldots, H_1$ son matrices hermitianas y unitarias, se tiene que

$$A = H_1^* H_2^* \cdots H_{n-1}^* H_n^* \begin{pmatrix} R_1 \\ \Theta \end{pmatrix}$$

es una descomposición QR completa de A. La matriz $Q = H_1^* H_2^* \cdots H_{n-1}^* H_n^*$ es unitaria. Si A tiene rango n, las primeras n columnas de Q son una base ortonormal de $\text{im}(A)$. Si Q_1 es la matriz formada por las primeras n columnas de Q, $Q_1 Q_1^*$ es el proyector ortogonal sobre $\text{im}(A)$. Las últimas $m-n$ columnas de Q

son una base ortonormal de $\mathrm{im}(A)^{\perp}$ y si Q_2 representa la matriz formada por las últimas $m-n$ columnas de Q, $Q_2 Q_2^*$ es el proyector ortogonal sobre $\mathrm{im}(A)^{\perp}$.
Ejemplo: Sea

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

Sea $x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Con $y = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $w = x - y$ se construye $H_1 = H_w$ y

$$H_1 A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Tomemos ahora $x = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Con $y = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $w = x - y$ se construye

$$\hat{H}_2 = H_w = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

La matriz

$$H_2 = \begin{pmatrix} 1 & \theta \\ \theta & \hat{H}_2 \end{pmatrix}$$

es tal que

$$H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Tomemos ahora $x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Con $y = \sqrt{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $w = x - y$ se construye

$$\hat{H}_3 = H_w = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

La matriz

$$H_3 = \begin{pmatrix} I & \theta \\ \theta & \hat{H}_3 \end{pmatrix}$$

es tal que

$$H_3 H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \Rightarrow \; A = \underbrace{H_1^* H_2^* H_3^*}_{=Q} \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Note que $R_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2} \end{pmatrix}$ no tiene elementos positivos en diagonal principal. Las matrices de Householder podrían definirse de modo que estos elementos resultasen positivos o cero, pero, para garantizar que el algoritmo se comporte de manera estable, se construyen las matrices H_w como se ha mostrado en este ejemplo.
Antes mencionamos que las tres primeras columnas de Q son una base ortonormal de imagen de A y que, si Q_1 es la matriz formada por las tres primeras columnas de Q, $Q_1Q_1^*$ es el proyector ortogonal sobre imagen de A. Además, si Q_2 es la matriz formada por la última columna de Q, $Q_2Q_2^*$ es el proyector ortogonal sobre el complemento ortogonal de la imagen de A.
Chequeemos esto en este ejemplo. La matriz A es tal que

$$\operatorname{im}(A) = \left\{ \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^4 \,:\, x_2 = x_4 \right\}, \quad \operatorname{im}(A)^\perp = \left\{ \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^4 \,:\, x_1 = x_3 = 0 \wedge x_2 = -x_4 \right\}.$$

La matriz Q_1 es tal que

$$Q_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad Q_1Q_1^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Además, Q_2 es tal que

$$Q_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad Q_2Q_2^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Compruebe que $P_1 := Q_1Q_1^*$ satisface $P_1^2 = P_1$, $P_1^* = P_1$ e $\operatorname{im}(P_1) = \operatorname{im}(A)$. Compruebe también que $P_2 := Q_2Q_2^* = I - P_1$, con lo que sabemos que P_2 es proyector ortogonal sobre $\operatorname{im}(P_1)^\perp$.

4. Matrices de proyección

Esta parte del documento es adicional al contenido del curso.
Si $P \in \mathbb{C}^{n\times n}$ satisface $P^2 = P$, P se denomina *matriz de proyección* o *proyector*. P descompone a cada vector x de $\mathbb{C}^n$ en la suma de un elemento en $\operatorname{im}(P)$ y un elemento en $\operatorname{im}(I - P)$,

$$x = Px + (x - Px) = Px + (I - P)x.$$

Esta descomposición es única.
Las dos últimas de las siguientes propiedades de P nos dicen por qué.

1. Si $x \in \operatorname{im}(P)$, entonces $x = Px$.

$$x \in \operatorname{im}(P) \Rightarrow x = Py, y \in \mathbb{C}^n \Rightarrow Px = P^2y = Py = x.$$

2. $I - P$ también es proyector.

3. $\text{im}(I-P) = \ker(P)$.

$$x \in \text{im}(I-P) \Rightarrow x = (I-P)x \Rightarrow Px = P(I-P)x = \theta \Rightarrow x \in \ker(P).$$

Por otro lado,

$$x \in \ker(P) \Rightarrow Px = \theta \Rightarrow x - Px = x \Rightarrow x \in \text{im}(I-P).$$

4. $\text{im}(P) \cap \ker(P) = \{\theta\}$.

Dado un proyector P, se cumple que $\mathbb{C}^n = \text{im}(P) \oplus \text{im}(I-P)$.
Por otro lado, si $\mathbb{C}^n = S_1 \oplus S_2$, es posible construir un proyector P con la propiedad $\text{im}(P) = S_1$ y $\ker(P) = \text{im}(I-P) = S_2$. Si $\{x_1, x_2, \ldots, x_p\}$ y $\{x_{p+1}, \ldots, x_n\}$ son bases de S_1 y S_2 respectivamente, la matriz P con las propiedades

$$\forall\, i \in \{1, 2, \ldots, p\} \,:\, Px_i = x_i, \qquad \forall\, i \in \{p+1, \ldots, n\} \,:\, Px_i = \theta$$

es el único proyector sobre S_1 ($\text{im}(P) = S_1$) y a lo largo de S_2 ($\text{im}(I-P) = S_2$) pues, si Q fuera otro proyector sobre S_1 a lo largo de S_2, necesariamente (como consecuencia de las propiedades anteriores) para todo $i \in \{1, 2, \ldots, p\}$, $Qx_i = x_i$ y para todo $i \in \{p+1, \ldots, n\}$, $Qx_i = \theta$.
Un proyector P es *ortogonal* si y solo si $\text{im}(I-P) = \text{im}(P)^\perp$.
Si P es proyector, P^* también es proyector pues

$$(P^*)^2 = (P^2)^* = P^*.$$

P^* es el único proyector sobre $\text{im}(P^*) = \ker(P)^\perp$, a lo largo de $\ker(P^*) = \text{im}(P)^\perp$.
Si P es ortogonal, es decir, si $\ker(P) = \text{im}(P)^\perp$, entonces P^* es el único proyector sobre $\text{im}(P^*) = \ker(P)^\perp = \text{im}(P)$, a lo largo de $\ker(P^*) = \text{im}(P)^\perp = \ker(P)$, es decir, si P es ortogonal, P y P^* son el mismo proyector.
Si P es un proyector no nulo cualesquiera, no necesariamente ortogonal, y $\|\cdot\|$ es una norma matricial inducida por una norma vectorial, entonces

$$\|P\| = \max_{x \neq \theta} \frac{\|Px\|}{\|x\|} \geq \max_{x \neq \theta, x \in \text{im}(P)} \frac{\|Px\|}{\|x\|} = 1.$$

Demostremos, por último, que un proyector P no nulo es ortogonal si y solo si $\|P\|_2 = 1$.
Es claro que si P es ortogonal, entonces $\|P\|_2 = 1$ pues

$$\|P\|_2 = \sqrt{\rho(P^*P)} = \sqrt{\rho(P^2)} = 1$$

pues los únicos valores propios de P son 1 (los vectores propios asociados a 1 son los que pertenecen a $\text{im}(P)$) y 0.
Además, si $\|P\|_2 = 1$, P es ortogonal. Para demostrar esta propiedad mostremos que si P no es ortogonal, entonces $\|P\|_2 > 1$.
Si P no es ortogonal, existen $x_1 \in \text{im}(P) - \{\theta\}$ y $x_2 \in \ker(P) - \{\theta\}$ tales que $\langle x_1; x_2 \rangle \neq 0$. Construyamos $x := x_1 + \alpha x_2$ de modo que $\|Px\|_2 > \|x\|_2$ (de este modo, deberá cumplirse $\|P\|_2 > 1$.) Por un lado, $Px = Px_1 + \alpha P x_2 = x_1$, por tanto, $\|Px\|_2 = \|x_1\|_2$. Además,

$$\|x\|_2^2 = \langle x_1 + \alpha x_2; x_1 + \alpha x_2 \rangle = \|x_1\|_2^2 + \alpha \langle x_2; x_1 \rangle + \overline{\alpha} \langle x_1; x_2 \rangle + |\alpha|^2 \|x_2\|_2^2.$$

Entonces,

$$\|Px\|_2^2 - \|x\|_2^2 = \text{Re}(-2\alpha \langle x_2; x_1 \rangle) - |\alpha|^2 \|x_2\|_2^2 = \text{Re}\left(-2\alpha \langle x_2; x - \alpha x_2 \rangle - |\alpha|^2 \|x_2\|_2^2\right) = \left(-2\alpha \langle x_2; x \rangle + |\alpha|^2 \|x_2\|_2^2\right).$$

Si $\alpha \in \mathbb{C}$ es tal que $\langle x_2; x \rangle = 0$ y $\alpha \neq 0$, entonces $\|Px\|_2^2 - \|x\|_2^2 > 0$.

$$\langle x_2; x \rangle = 0 \Leftrightarrow \langle x_2; x_1 + \alpha x_2 \rangle = 0 \Leftrightarrow \langle x_2; x_1 \rangle + \overline{\alpha} \|x_2\|_2^2 = 0 \Leftrightarrow \alpha = -\frac{\langle x_1; x_2 \rangle}{\|x_2\|_2^2}.$$