

CAPITOLO 5

Metodo QR

Il metodo QR (Francis, 1961) per il calcolo degli autovalori e degli autovettori di una matrice diagonalizzabile di dimensioni non troppo grandi è generalmente applicabile con successo, essendo fortemente stabile e - compatibilmente con le dimensioni della matrice - non troppo costoso. La forte stabilità del metodo QR sta in sostanza a significare che, assegnata la matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, gli autovalori λ_i^* e gli autovettori $\mathbf{x}_i^*$, per $i = 1 : n$, che si ottengono da calcolo sono essenzialmente gli autovalori e gli autovettori della *matrice di macchina*, e che si possono presentare problematicità soltanto in caso di malcondizionamento del problema.

Dato che A è diagonalizzabile, esiste una matrice X invertibile tale che

$$X^{-1} A X = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n), \quad (5.1)$$

ovvero la i -esima colonna di X è un autovettore associato all' i -esimo autovalore λ_i di A , per $i = 1 : n$. Il condizionamento del problema agli autovalori, ovvero quanto possono variare gli autovalori di A in seguito a perturbazioni della matrice, dipende dalla matrice X che diagonalizza A : se è piccola la sua distanza normalizzata dall'insieme delle matrici singolari, ovvero se è grande il suo numero di condizionamento spettrale $\kappa_2(X)$, allora ad una piccola perturbazione di A può corrispondere una grande variazione dello spettro; in questo caso si parla di malcondizionamento del problema.

La strategia più naturale per calcolare le matrici X e Λ consiste nella definizione di un procedimento iterativo, basato su operazioni di similitudine

$$A^{(k)} = X^{(k-1)-1} A^{(k-1)} X^{(k)}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad A^{(0)} = A, \quad (5.2)$$

che dia luogo a due successioni di matrici convergenti per $k \rightarrow \infty$, $\{A^{(k)}\}$ a Λ e $\{\tilde{X}^{(k)}\}$ a X , dove $\tilde{X}^{(k)} = X^{(1)} X^{(2)} \dots X^{(k)}$. D'altro canto, si dimostra che per una generica operazione di similitudine in aritmetica finita vale

$$(Y^{-1} A Y)^* = Y^{-1} A Y + E,$$

con

$$\frac{\|E\|_2}{\|A\|_2} \approx \kappa_2(Y) \varepsilon,$$

dove ε è la precisione di macchina. È chiaro dunque che eseguire le operazioni di similitudine usando matrici unitarie (ricordiamo che per una matrice unitaria Q , vale $\|Q\|_2 = 1$, e pertanto $\kappa_2(Q) = 1$) elimina il rischio di introdurre instabilità

nei calcoli. Nel metodo QR per l'approssimazione dello spettro della matrice A si effettuano esclusivamente trasformazioni di similitudine unitarie.

5.1. Teorema della decomposizione di Schur e metodo base di Francis

Il seguente teorema afferma che ogni matrice è unitariamente simile ad una matrice triangolare superiore.

TEOREMA 5.1 (Schur). *Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Esiste Q unitaria tale che*

$$Q^H A Q = U = \Lambda + U^+, \quad (5.3)$$

ove U è triangolare superiore e U^+ è la parte strettamente triangolare superiore di U .

DIMOSTRAZIONE. Dimostriamo l'asserto per induzione sulla dimensione. Il caso $n = 1$ è banale (una qualunque matrice è triangolare, quindi $Q = 1$). Supponiamo l'asserto vero per matrici di dimensione $n - 1$. Siano $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ gli autovalori di A . Sia $\mathbf{x}_1$ un autovettore corrispondente all'autovalore λ_1 e assumiamo, senza perdita di generalità, che $\mathbf{x}_1^H \mathbf{x}_1 = 1$. Consideriamo la matrice $X = (\mathbf{x}_1, X_2)$ unitaria, ovvero $X_2 \in \mathbb{C}^{n \times (n-1)}$ ha colonne ortonormali e $\mathbf{x}_1^H X_2 = \mathbf{0}$. Si ha

$$X^H A X = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^H \\ X_2^H \end{pmatrix} A (\mathbf{x}_1, X_2) = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^H A \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_1^H A X_2 \\ X_2^H A \mathbf{x}_1 & X_2^H A X_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \mathbf{x}_1^H \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_1^H A X_2 \\ \lambda_1 X_2^H \mathbf{x}_1 & X_2^H A X_2 \end{pmatrix},$$

dove, nell'ultima uguaglianza, abbiamo sfruttato la relazione $A \mathbf{x}_1 = \lambda_1 \mathbf{x}_1$. Otteniamo quindi

$$X^H A X = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{x}_1^H A X_2 \\ \mathbf{0} & X_2^H A X_2 \end{pmatrix}.$$

Per una matrice triangolare superiore a blocchi, ovvero una matrice quadrata che ha blocchi quadrati sulla diagonale e i cui blocchi sotto la diagonale principale sono nulli, si può verificare facilmente che gli autovalori sono l'unione degli autovalori dei suoi blocchi diagonali, contando le rispettive molteplicità; la matrice $X^H A X$ è simile ad A , quindi ha lo stesso spettro di A : ne segue che $A_2 := X_2^H A X_2 \in \mathbb{C}^{(n-1) \times (n-1)}$ ha autovalori $\lambda_2, \dots, \lambda_n$. Per l'ipotesi induttiva, possiamo assumere l'esistenza di una matrice unitaria $Q_2 \in \mathbb{C}^{(n-1) \times (n-1)}$ tale che $Q_2^H A_2 Q_2 = U_{22}$, dove U_{22} è triangolare superiore (e ha gli autovalori $\lambda_2, \dots, \lambda_n$ sulla diagonale). Posto

$$Q := X \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^H \\ \mathbf{0} & Q_2 \end{pmatrix},$$

si ha

$$Q^H A Q = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^H \\ \mathbf{0} & Q_2^H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{x}_1^H A X_2 \\ \mathbf{0} & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^H \\ \mathbf{0} & Q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{x}_1^H A X_2 Q_2 \\ \mathbf{0} & Q_2^H A_2 Q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{u}_{12}^H \\ \mathbf{0} & U_{22} \end{pmatrix},$$

che permette di concludere la dimostrazione. $\square$

La decomposizione di Schur non è unica, potendo variare l'ordine nel quale gli autovalori figurano in Λ (e quindi Q e U^+).

La necessità, per avere un algoritmo stabile, di limitarsi ad usare similitudini unitarie comporta dunque

a) la sostituzione della (5.1) con la (5.3) (e va notato che la (5.3) fornisce, come la (5.1), gli autovalori ma richiede invece, in generale, un lavoro aggiuntivo per il calcolo degli autovettori, dei quali, in generale, fornisce direttamente solo quello associato a λ_1);

b) la sostituzione delle iterazioni (5.2) con iterazioni del tipo

$$A^{(k)} = Q^{(k)H} A^{(k-1)} Q^{(k)}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad A^{(0)} = A, \quad (5.4)$$

costruite in modo che $\{A^{(k)}\}$ e $\{\tilde{Q}^{(k)}\}$, con $\tilde{Q}^{(k)} = Q^{(1)} Q^{(2)} \dots Q^{(k)}$, convergano rispettivamente alle matrici U e Q in (5.3).

Il lavoro aggiuntivo indicato nel punto a) viene di fatto evitato nel caso in cui A sia normale. Infatti sussiste il seguente importante corollario del Teorema di Schur, che abbiamo usato nella dimostrazione della Proposizione 2.10.

COROLLARIO 5.2. *Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ e sia (5.3) una sua decomposizione di Schur. Si ha $U^+ = 0$ se e solo se A è normale.*

DIMOSTRAZIONE. Dimostriamo prima che se A è normale allora U è diagonale. Mostriamo inizialmente che U è normale. Dato che vale $AA^H = A^H A$, per il Teorema di Schur si ha

$$U^H U = Q^H A^H Q Q^H A Q = Q^H A^H A Q = Q^H A A^H Q = Q^H A Q Q^H A^H Q = U U^H,$$

da cui si deduce che U è normale.

Mostriamo ora, per induzione sulla dimensione n , che una matrice triangolare superiore normale è diagonale. Per $n = 1$ è ovviamente vero. Assumiamo la tesi vera per $n - 1$. Dato che U è triangolare superiore, l'elemento di posto $(1, 1)$ della matrice $U^H U$ è uguale all'unico prodotto $\bar{u}_{1,1} u_{1,1} = |u_{1,1}|^2$, mentre l'elemento di posto $(1, 1)$ della matrice $U U^H$ è uguale alla somma $\sum_{j=1}^n u_{1,j} \bar{u}_{1,j} = |u_{1,1}|^2 + \sum_{j=2}^n |u_{1,j}|^2$. Dunque, dato che $U^H U = U U^H$, varrà $u_{1,j} = 0$ per ogni $j = 2, \dots, n$. Abbiamo quindi che nella prima riga di U tutti gli elementi sono nulli tranne quello principale. Indichiamo con U_{n-1} la sottomatrice (triangolare superiore) che si ottiene da U eliminando prima riga e prima colonna. Dato che $U^H U = U U^H$, varrà ovviamente anche $U_{n-1}^H U_{n-1} = U_{n-1} U_{n-1}^H$ e dunque, per l'ipotesi induttiva, U_{n-1} è diagonale. Quindi U risulta diagonale.

Dimostriamo ora che se $U^+ = 0$ allora A è normale. Posto $U = \Lambda$, si ha

$$A^H A = Q \Lambda^H Q^H Q \Lambda Q^H = Q \Lambda^H \Lambda Q^H; \quad A A^H = Q \Lambda Q^H Q \Lambda^H Q^H = Q \Lambda \Lambda^H Q^H.$$

Dato che $\Lambda^H \Lambda = \Lambda \Lambda^H = \text{diag}(|\lambda_1|^2, \dots, |\lambda_n|^2)$, dalle precedenti relazioni si ha $A^H A = A A^H$. Dunque la dimostrazione è conclusa. $\square$

OSSERVAZIONE 5.1. *Dal Corollario 5.2 si deduce che il problema agli autovalori relativo ad una matrice normale è perfettamente condizionato.*

Per quanto riguarda la costruzione delle iterazioni in (5.4) evidenziata nel punto b), nel metodo QR è essere realizzata usando la fattorizzazione QR. Di fatto, se $A^{(k)} = QR$ ovvero $Q^H A^{(k)} = R$, allora la matrice $A^{(k+1)} = RQ$ è unitariamente simile ad $A^{(k)}$ perché $A^{(k+1)} = Q^H A^{(k)} Q$; iterando si perviene alla versione base dell'algoritmo QR, che si dimostra realizzare numericamente una decomposizione di Schur di A (ovvero la successione $\{A^{(k)}\}$ converge a U) sotto condizioni poco restrittive e con una accettabile rapidità di convergenza. Questa versione dell'algoritmo QR è stata progressivamente raffinata, introducendo accorgimenti volti sia a indebolire le condizioni sufficienti a garantire la convergenza, che ad aumentare la rapidità di convergenza.

5.2. Prima variante. Trasformazione in forma di Hessenberg superiore

Il primo degli accorgimenti usati per migliorare le prestazioni del metodo QR consiste nel trasformare inizialmente la matrice A in una matrice H di Hessenberg superiore mediante una trasformazione di similitudine unitaria. È immediato osservare che questo passo iniziale è in accordo con la necessità di mantenere stabile l'algoritmo (la similitudine è unitaria) e permette di aumentare la rapidità di convergenza (rimangono da azzerare solo $n - 1$ elementi sulla sottodiagonale). A partire da $H \in \mathbb{C}^{n \times n}$ in forma di Hessenberg superiore, il metodo QR può essere schematizzato come segue:

$H^{(0)} := H;$
per $k = 1, 2, \dots$
 si determinano $Q^{(k)}, R^{(k)}$ tali che $H^{(k-1)} = Q^{(k)} R^{(k)};$
 si pone $H^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)};$
fine

L'introduzione della prima variante conferisce notevole efficienza allo schema base: tutte le matrici $H^{(k)}$ generate dall'algoritmo sono unitariamente simili a H ,

$$\begin{aligned} H^{(k)} &= R^{(k)} Q^{(k)} = Q^{(k)H} (Q^{(k)} R^{(k)}) Q^{(k)} = Q^{(k)H} H^{(k-1)} Q^{(k)} = \\ &= (Q^{(0)} Q^{(1)} \dots Q^{(k)})^H H^{(0)} (Q^{(0)} Q^{(1)} \dots Q^{(k)}), \quad \text{per } k \geq 1, \end{aligned}$$

e risultano in forma di Hessenberg superiore, con un costo computazionale per ogni passo dell'ordine di $\mathcal{O}(n^2)$ operazioni, laddove l'algoritmo base ne richiede $\mathcal{O}(n^3)$. Di fatto, $H^{(0)}$ è in forma di Hessenberg superiore e al primo passo si guadagna un ordine di grandezza nel costo computazionale per la sua fattorizzazione QR (ovvero $\mathcal{O}(n^2)$, e non $\frac{4}{3}n^3$) e si produce una matrice $Q^{(1)}$ anch'essa in forma di Hessenberg superiore, permettendo così sia di ridurre a $\mathcal{O}(n^2)$ il costo del prodotto matriciale $R^{(1)} Q^{(1)}$, che di produrre una matrice $H^{(1)}$ anch'essa in forma di Hessenberg superiore; ad ogni passo successivo si può dunque fare il medesimo ragionamento.

Se la matrice assegnata A è hermitiana, allora H è in forma tridiagonale (hermitiana), e il costo computazionale per ogni passo si riduce ulteriormente all'ordine di $\mathcal{O}(n)$ operazioni.

Una condizione sufficiente per la convergenza del metodo QR è data dal seguente teorema.

TEOREMA 5.3. *Se gli autovalori di A hanno tutti moduli distinti, ovvero $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$, allora la successione $\{H^{(k)}\}$ tende, per $k \rightarrow \infty$, alla matrice triangolare superiore U in (5.3) (dove sulla diagonale appaiono gli autovalori in ordine di modulo decrescente). La velocità di convergenza a zero degli $n-1$ elementi sottodiagonali di $H^{(k)}$, che denotiamo $h_{i,i-1}^{(k)}$, per $i = 2, \dots, n$, è data da*

$$|h_{i,i-1}^{(k)}| = \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_{i-1}}\right|^k\right). \quad (5.5)$$

5.3. Algoritmo di Householder

Come si è detto, la prima variante del metodo QR base consiste nel trasformare la matrice data A in una unitariamente simile H di struttura di Hessenberg superiore. L'algoritmo di Householder (1964) svolge questa funzione.

Analogamente a come abbiamo operato nella fattorizzazione QR, faremo uso dei riflettori elementari. L'algoritmo richiede complessivamente $n-2$ passi per produrre la matrice di Hessenberg superiore $H = U^H A U$, con $U = U_1 \cdots U_{n-2}$ matrice unitaria prodotto di $n-2$ riflettori elementari U_k , $k = 1, \dots, n-2$. Denotiamo con $A^{(0)}$ la matrice assegnata. La novità rispetto all'algoritmo per la fattorizzazione QR sta nell'applicare i riflettori elementari sia a sinistra che a destra.

Dato $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$, al k -esimo passo dell'algoritmo consideriamo il riflettore elementare $U^{(n-k)}$ definito in (1.2) e scelto in modo da soddisfare la Proposizione 1.5,

$$U^{(n-k)}(x_{k+1}, \dots, x_n)^T = -\sigma_k \mathbf{e}_1^{(n-k)},$$

e costruiamo il riflettore elementare U_k ,

$$U_k = \begin{pmatrix} I_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U^{(n-k)} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{n \times n},$$

in modo tale che a U_k risulta associato il vettore

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{u}_k \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^n, \quad \mathbf{u}_k = (x_{k+1}, \dots, x_n)^T + \sigma_k \mathbf{e}_1^{(n-k)} \in \mathbb{C}^{(n-k)}.$$

Il ruolo del vettore $\mathbf{x}$ sarà giocato dalla k -esima colonna della matrice $A^{(k-1)}$. Per $k = 1, \dots, n-2$, il riflettore elementare U_k è dunque costruito in modo tale che, moltiplicato a sinistra di $A^{(k-1)}$, ha l'effetto di non cambiarne le prime k righe, di lasciarne invariati gli zeri precedentemente introdotti nelle colonne $1, \dots, k-1$, e di annullarne gli elementi di posizione $k+2, \dots, n$ nella colonna k -esima.

La matrice $U_k A^{(k-1)}$ viene poi moltiplicata a destra per lo stesso riflettore elementare U_k con l'effetto di non cambiarne le prime k colonne. Di fatto, si è creata la matrice $A^{(k)} = U_k A^{(k-1)} U_k$ simile alla precedente e sono stati introdotti nuovi zeri nella k -esima colonna dalla riga $(k+2)$ -esima in poi. Si ripetono dunque tali operazioni fino ad ottenere

$$H = A^{(n-2)} = U_{n-2} A^{(n-3)} U_{n-2} = U_{n-2} \cdots U_1 A^{(0)} U_1 \cdots U_{n-2} = U^H A U,$$

con un costo computazionale di $\frac{10}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ operazioni.

Se $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ è hermitiana, l'algoritmo di Householder trasforma A in una matrice tridiagonale unitariamente simile. Infatti, nel moltiplicare al k -esimo passo la matrice $U_k A^{(k-1)}$ a destra per il riflettore elementare U_k , si annullano gli elementi di posizione $k+2, \dots, n$ della riga k -esima, dato che la colonna e la riga k -esime di $A^{(k-1)}$ hanno gli stessi elementi coniugati, e si preservano gli zeri introdotti precedentemente nelle righe $1, \dots, k-1$. Il costo computazionale si riduce a $\frac{4}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ operazioni.

Osserviamo che, se A è sparsa [eventualmente hermitiana], a differenza dell'iterazione di Arnoldi [eventualmente di Lanczos] portata avanti fino a $k = n$, l'algoritmo di Householder non sfrutta la sparsità per risparmiare operazioni, ovvero non si avvale di un algoritmo $\mathbf{x} \rightarrow \boxed{\text{black box}} \rightarrow A\mathbf{x}$ a costo computazionale ridotto. Non ha comunque molto senso fare confronti per n grande perché entrambi i metodi presenterebbero forti criticità: il costo del metodo di Householder diverrebbe insostenibile, mentre il metodo di Arnoldi [eventualmente di Lanczos] risulterebbe estremamente instabile dovendo portare avanti le iterazioni fino a $k = n$.

5.4. Seconda variante. Tecnica dello shift e deflazione

La relazione (5.5) suggerisce che la velocità di convergenza del metodo QR dipende da quanto sono ben separati gli autovalori. L'accorgimento che illustriamo serve ad aumentare la velocità di convergenza della procedura e consiste in una tecnica di traslazione. Inoltre, dato che l'azzeramento degli $n-1$ elementi sottodiagonali della successione di matrici di Hessenberg superiore di fatto avverrà ordinatamente dal basso verso l'alto, assoceremo a questa tecnica un processo di deflazione. Tale strategia si traduce in una riduzione progressiva della dimensione del problema. In maggior dettaglio, nel momento in cui $|h_{n,n-1}^{(k)}|$ vale approssimativamente 0, $h_{n,n}^{(k)}$ risulterà essere una approssimazione di λ_n ; a questo punto il metodo QR proseguirà sulla matrice $H^{(k)}(1:n-1, 1:n-1)$ - usando notazioni MATLAB - e così via facendo decrescere le dimensioni della matrice fino a 2×2 in modo da calcolare tutti gli autovalori di A .

Torniamo alla tecnica dello shift. Assumiamo in un primo momento di avere a disposizione un dato *shift* per ogni iterazione del metodo QR (ovvero la quantità $\mu_k \in \mathbb{C}$ alla k -esima iterazione), e notiamo che le matrici $H^{(k)}$ generate dal seguente schema risultano unitariamente simili ad A :

si determina $H^{(0)} = Q^{(0)H} A Q^{(0)}$;
per $k = 1, 2, \dots$
 si determinano $Q^{(k)}, R^{(k)}$ tali che $H^{(k-1)} - \mu_k I = Q^{(k)} R^{(k)}$;
 si pone $H^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)} + \mu_k I$;
fine

(Il primo passo consiste nell'applicazione dell'algoritmo di Householder.)

Descriviamo ora una legge che associa μ_k al passo k . Euristicamente l'elemento di posizione (n, n) di $H^{(k-1)}$ è, già per k non troppo grande, una discreta approssimazione di λ_n e, di fatto, l'elemento di posto $(n, n-1)$ sarà il primo a convergere a 0. Tale osservazione suggerisce la scelta dello shift

$$\mu_k = h_{n,n}^{(k-1)},$$

per far sì che per gli autovalori $\lambda_i - \mu_k$, con $i = 1, \dots, n$, di $H^{(k-1)} - \mu_k I$, valga

$$|\lambda_i - \mu_k| \gg |\lambda_n - \mu_k| \quad i = 1, \dots, n-1.$$

Dal Teorema 5.3, la convergenza a zero dell'ultimo elemento sottodiagonale di $H^{(k-1)} - \mu_k I$ con questa variante dipenderà da

$$\left| \frac{\lambda_n - \mu_k}{\lambda_{n-1} - \mu_k} \right|.$$

Ad ogni passo k , l'approssimazione $h_{n,n}^{(k-1)} \approx \lambda_n$ migliora, e di conseguenza la velocità di convergenza aumenta perché lo shift $\mu_k = h_{n,n}^{(k-1)}$ viene di volta in volta aggiornato. In pratica, data una tolleranza τ , si considera che l'autovalore λ_n è stato calcolato con una approssimazione soddisfacente quando

$$|h_{n,n-1}^{(k)}| < \tau (|h_{n-1,n-1}^{(k)}| + |h_{n,n}^{(k)}|);$$

a questo punto l'elemento $h_{n,n-1}^{(k)}$ viene considerato nullo. Di fatto ciò succede in un numero limitato di passi; si dimostra infatti che la convergenza a zero della successione $\{h_{n,n-1}^{(k)}\}$ è quadratica.

Giunti a convergenza, la strategia della deflazione si traduce nell'applicare la medesima procedura alla matrice ridotta (ovvero porre in maniera ricorsiva $n \rightarrow n-1$ fino a quando n è uguale a 2).

Osserviamo che nella versione finale del nostro algoritmo, con le due varianti illustrate, le operazioni si riducono a $\mathcal{O}(n^3)$: solo $\mathcal{O}(1)$ iterazioni per determinare ognuno degli n autovalori, al costo di $\mathcal{O}(n^2)$ operazioni a iterazione, si devono aggiungere alle $\mathcal{O}(n^3)$ operazioni per la trasformazione di similitudine iniziale di A in matrice di Hessenberg superiore. Per quanto riguarda la stabilità, ricordiamo che tutta la procedura fa ricorso a trasformazioni di similitudine unitarie.