Algoritmo QR

Sia A un endomorfismo di uno spazio vettoriale $\mathcal{U}$ di dimensione n, definito su $\mathbb{C}$ e dotato di prodotto interno.

Sia $\{b_1 \dots b_n\}$ una base ortonormale e $\mathbf{A}$ la corrispondente matrice dell'endomorfismo A.

Si mostra come è possibile costruire una successione di basi tale che la corrispondente successione delle matrici di A abbia come limite una matrice triangolare superiore.

L'algoritmo che viene descritto risulta essere l'algoritmo più generale esistente per il calcolo di tutti gli autovalori di un endomorfismo.

Si consideri la seguente procedura consistente nella applicazione ripetuta di A ad una famiglia di vettori e nella simultanea costruzione di una successione di basi:

(0.1) si applichi A ai vettori $\{b_1 \dots b_n\}$; i vettori $\{Ab_1 \dots Ab_n\}$ sono definiti, attraverso le loro componenti, dalla matrice $\mathbf{A}$;

(0.2) si applichi l'algoritmo di fattorizzazione di Givens o di Householder;[1] si genera in tal modo una nuova base attraverso una procedura di ortogonalizzazione dei vettori $\{Ab_1 \dots Ab_n\}$ a cui corrisponde la relazione

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}_0 \mathbf{U}_0$$

(1.1) si applichi A ai vettori della nuova base definita da $\mathbf{Q}_0$; in termini di componenti rispetto alla nuova base i vettori ottenuti risultano definiti dalle colonne della corrispondente matrice di A

$$\mathbf{A}_1 := \mathbf{Q}_0^{-1} \mathbf{A} \mathbf{Q}_0 = \mathbf{U}_0 \mathbf{Q}_0$$

(1.2) si applichi di nuovo l'algoritmo di fattorizzazione di Givens o di Householder; si genera così una base attraverso una procedura di ortogonalizzazione dei vettori appena calcolati a cui corrisponde la relazione

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{Q}_1 \mathbf{U}_1$$

(...) $\qquad \dots$

(k.1) si applichi A ai vettori della nuova base definita da $\mathbf{Q}_{k-1}$; in termini di componenti rispetto alla nuova base i vettori ottenuti risultano definiti dalle colonne della corrispondente matrice di A

$$\mathbf{A}_k := \mathbf{Q}_{k-1}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{Q}_{k-1} = \mathbf{U}_{k-1} \mathbf{Q}_{k-1}$$

(k.2) si applichi di nuovo l'algoritmo di fattorizzazione di Givens o di Householder; si genera così una base ortonormale attraverso una procedura di ortogonalizzazione dei vettori appena calcolati a cui corrisponde la relazione

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{Q}_k \mathbf{U}_k$$

[1] In questo contesto ci si riferisce alla generalizzazione, peraltro banale, di tali algoritmi al caso di spazi vettoriali definiti su $\mathbb{C}$.

Si dimostra che se gli autovalori di A sono tali che

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \ldots > |\lambda_r|$$

allora la successione $\mathbf{A}_k$ ha come limite una matrice triangolare superiore.

Si osservi infatti che, poiché la procedura di ortogonalizzazione utilizzata modifica solo la norma del primo vettore, la evoluzione del primo vettore della base è descritta dalla successione generata dal *metodo delle potenze*. Tale successione ha come insieme attrattore un sottospazio W_1 dell'autospazio di A corrispondente a λ_1,[2] di dimensione 1. Ponendo $\mathrm{U}_1 := \mathrm{W}_1$, si consideri la decomposizione

$$\mathcal{U} = \mathrm{U}_1 \oplus \mathrm{U}_1^\perp$$

e si indichi con P_1 la proiezione ortogonale su U_1.

La successione dei vettori che trae origine da b_2, mantenendosi sempre ortogonale alla successione che trae origine da b_1, ha come insieme attrattore un sottospazio di $\mathrm{U}_1^\perp$. Se poi si considera la proiezione su $\mathrm{U}_1^\perp$ di tale successione, questa risulta identica, a meno di una successione che tende al vettore nullo, alla successione generata dal metodo delle potenze per l'endomorfismo

$$(I - P_1)A : \mathrm{U}_1^\perp \to \mathrm{U}_1^\perp$$

applicato al vettore $(I - P_1)b_2$. L'insieme attrattore di tale successione è dunque un sottospazio W_2, di dimensione 1, dell'autospazio di $(I - P_1)A|_{\mathrm{U}_1^\perp}$ corrispondente all'autovalore di modulo massimo.

È bene notare che lo spettro di $(I - P_1)A|_{\mathrm{U}_1^\perp}$ è contenuto nello spettro di A, come è evidente dalla matrice di A in una base costituita da un vettore di U_1 e da una base di $\mathrm{U}_1^\perp$.

Ponendo

$$\mathrm{U}_2 := \mathrm{U}_1 \oplus \mathrm{W}_2$$

si consideri poi la decomposizione

$$\mathcal{U} = \mathrm{U}_2 \oplus \mathrm{U}_2^\perp$$

e, indicando con P_2 la proiezione ortogonale su U_2, l'endomorfismo

$$(I - P_2)A : \mathrm{U}_2^\perp \to \mathrm{U}_2^\perp$$

La successione che trae origine dal vettore b_3 ha come insieme attrattore un sottospazio W_3 di dimensione 1 dell'autospazio corrispondente all'autovalore di modulo massimo dell'endomorfismo $(I - P_2)A|_{\mathrm{U}_2^\perp}$.

Procedendo in questo modo si arriva a svelare che l'algoritmo[3] QR genera indirettamente una famiglia di sottospazi U_i invarianti rispetto ad A e tali che

$$\mathrm{U}_1 \subset \mathrm{U}_2 \subset \ldots \subset \mathrm{U}_n = \mathcal{U}$$

---

[2] Con riferimento alla decomposizione di $\mathcal{U}$ nella somma di autospazi generalizzati V_{λ_i}, si assume per semplicità che le proiezioni dei vettori $\{b_1 \ldots b_n\}$ su ciascun sottospazio V_{λ_i} siano diverse dal vettore nullo. Se questo non accade cambierà semplicemente l'ordine in cui vengono considerati gli autovalori e i corrispondenti autospazi.

[3] Il nome deriva dal fatto che per la matrice $\mathbf{U}$ il simbolo tradizionale è $\mathbf{R}$.

In particolare viene generata una base ortonormale $\{\acute{b}_1 \dots \acute{b}_n\}$ tale che

$$\acute{b}_i \in (\mathrm{U}_i \cap \mathrm{U}_{i-1}^{\perp})$$

Questa è dunque una base in cui la matrice di A è triangolare superiore.

È utile esaminare l'algoritmo descritto anche da un diverso punto di vista.
Nel caso in cui l'endomorfismo A sia un automorfismo, alle espressioni

$$\mathbf{A}_k := \mathbf{U}_{k-1}\mathbf{Q}_{k-1}$$
$$\mathbf{A}_k = \mathbf{Q}_k\mathbf{U}_k$$

corrispondono, per l'endomorfismo aggiunto A^*,

$$\mathbf{A}_k^H = \mathbf{Q}_{k-1}^H\mathbf{U}_{k-1}^H$$
$$\mathbf{A}_k^H = \mathbf{U}_k^H\mathbf{Q}_k^H$$

e, per il suo inverso $(A^*)^{-1}$,

$$\mathbf{A}_k^{-H} = \mathbf{L}_{k-1}\mathbf{Q}_{k-1}$$
$$\mathbf{A}_k^{-H} = \mathbf{Q}_k\mathbf{L}_k$$

avendo posto $\mathbf{L}_k := \mathbf{U}_k^{-H}$.
Da queste espressioni risulta evidente che alla applicazione ripetuta dell'endomorfismo A seguita dalla ortogonalizzazione corrisponde, implicitamente, la applicazione ripetuta di $(A^*)^{-1}$ seguita da una diversa procedura di ortogonalizzazione. Questa infatti inizia dall'ultimo vettore invece che dal primo, essendo $\mathbf{L}_k$ triangolare inferiore. Tale procedura genera però la stessa base, essendo questa definita dalla stessa matrice $\mathbf{Q}_k$.
La evoluzione dell'ultimo vettore della base è dunque descritta dalla successione generata, per l'endomorfismo A^*, dalla *iterazione inversa*. Tale successione ha come insieme attrattore un sottospazio V_1 dell'autospazio di A^* corrispondente all'autovalore $\overline{\lambda}_r$,[4] di dimensione 1. Ponendo $\mathrm{U}_{n-1} := \mathrm{V}_1^{\perp}$, si consideri la decomposizione

$$\mathcal{U} = \mathrm{U}_{n-1} \oplus \mathrm{U}_{n-1}^{\perp}$$

e si indichi con P_{n-1} la proiezione ortogonale su U_{n-1}.
La successione che trae origine da b_{n-1}, mantenendosi sempre ortogonale alla successione che trae origine da b_n, ha come insieme attrattore un sottospazio di U_{n-1}. Se poi si considera la proiezione su U_{n-1} di tale successione, questa risulta identica, a meno di una successione che tende al vettore nullo, alla successione generata dalla iterazione inversa per l'endomorfismo

$$P_{n-1}A^* : \mathrm{U}_{n-1} \to \mathrm{U}_{n-1}$$

applicata al vettore $P_{n-1}b_{n-1}$.
Adottando questo punto di vista, si interpreta di nuovo l'algoritmo QR come costruzione dei sottospazi U_i realizzata però con la applicazione ripetuta di $(A^*)^{-1}$.
È questa interpretazione che indica la possibilità di migliorare le proprietà di convergenza attraverso l'uso dello *shift*, tipico della iterazione inversa.

[4] Gli autovalori di A^* sono i coniugati degli autovalori di A. Infatti se $P(\lambda)$ è il polinomio caratteristico di A, il polinomio caratteristico di A^* è $\overline{P}(\lambda)$, essendo le matrici dei due endomorfismi in una base ortonormale l'una la trasposta coniugata dell'altra.