

**SOBRE UM MÉTODO ASSEMELHADO AO DE
FRANCIS PARA A DETERMINAÇÃO DE
AUTOVALORES DE MATRIZES**

Danilo Elias de Oliveira

Dissertação de Mestrado
Pós-Graduação em Matemática Aplicada

Sobre um método assemelhado ao de Francis para a determinação de autovalores de matrizes

Danilo Elias de Oliveira

Dissertação apresentada ao Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Câmpus de São José do Rio Preto, São Paulo, para a obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada.

Orientadora: Profa. Dra. Eliana Xavier Linhares de Andrade

São José do Rio Preto

Fevereiro de 2006

*Aos meus pais, Gilberto e Júlia,
e ao meu irmão, Vilmar,
ofereço.*

*À minha mocinha, Cristiane,
dedico.*

Agradecimentos

Primeiramente, devo agradecer a Deus por ter me dado a vida e oportunidade de poder conviver ao lado de pessoas maravilhosas; ao Espírito Santo por me iluminar e abençoar e à Nossa Senhora que, através da Legião de Maria, me proporcionou uma verdadeira experiência de vida.

Aos meus pais e irmão que sempre me apoiaram e me incentivaram a cursar o mestrado. Além disso, por todo amor, carinho e atenção que tiveram comigo.

À minha namorada Cristiane, querida mocinha, por todo carinho, atenção, paciência e compreensão mesmo nas horas em que mais precisei.

Um agradecimento especial à Profa. Dra. Eliana Xavier Linhares de Andrade pela dedicação, paciência e amizade que sempre teve comigo.

Ao meu amigo Fabiano por me incentivar a fazer o mestrado.

Aos meus amigos e irmãos do Philadelpho, Ronaldo e Nilo, que sempre me apoiaram e incentivaram.

A todos os professores e funcionários que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho. Em especial aos funcionários do DCCE, Getúlio, Luiza, Olga e Marcos.

A todos os meus amigos de Pós-Graduação, em especial, à turma do futebol.

Às minhas queridas Mayla e Uly.

À CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, pelo auxílio financeiro.

“ O livro do universo está escrito
em linguagem matemática. ”

Galileu Galilei

Resumo

O principal objetivo deste trabalho é apresentar, discutir as qualidades e desempenho e provar a convergência de um método iterativo para a solução numérica do problema de autovalores de uma matriz, que chamamos de “Método Assemelhado ao de Francis (MAF)”. O método em questão distingue-se do QR de Francis pela maneira, mais simples e rápida, de se obter as matrizes ortogonais Q_k , $k = 1, 2, \dots$. Apresentamos, também, uma comparação entre o MAF e os algoritmos QR de Francis e LR de Rutishauser.

Palavras-chave: autovalor; algoritmo QR; algoritmo LR; Decomposição de Cholesky.

Abstract

The main purpose of this work is to present, to discuss the qualities and performance and to prove the convergence of an iterative method for the numerical solution of the eigenvalue problem, that we have called the "Método Assemblado ao de Francis (MAF)". This method differs from the QR method of Francis by providing a simpler and faster technique of getting the unitary matrices Q_k , $k = 1, 2, \dots$. We present, also, a comparison analysis between the MAF and the QR of Francis and LR of Rutishauser algorithms.

Keywords: eigenvalue; QR algorithm; LR algorithm; Cholesky decomposition.

Sumário

1	Introdução	1
2	Pré-Requisitos	5
2.1	Espaço vetorial e produto interno	5
2.2	Normas de vetores e matrizes	7
2.3	Tipos especiais de matrizes quadradas	8
2.4	Autovalores e autovetores	12
2.5	Reflexões de Householder	18
2.6	Rotações de Givens	21
2.7	Eliminação de Gauss e Decomposição LU	23
2.8	Decomposição QR	26
2.9	Decomposição de Cholesky	29
3	Algoritmo LR de Rutishauser	30
3.1	Algoritmo LR de Rutishauser	30
3.1.1	Prova da convergência de A_s	31
3.1.2	Matrizes hermitianas definidas-positivas	35
3.1.3	Autovalores complexos	36
3.1.4	Algoritmo LR modificado	40
3.1.5	Matrizes na forma de Hessenberg	42
3.1.6	Aceleração da convergência	43
3.1.7	Deflação de uma matriz	47
3.1.8	<i>Shift</i> na origem	48

4	Algoritmo QR de Francis	50
4.1	Algoritmo QR de Francis	50
4.1.1	Convergência do algoritmo QR	51
4.1.2	Prova formal da convergência	51
4.1.3	Autovalores desordenados	54
4.1.4	Autovalores de mesmo módulo	55
4.1.5	Decomposição de A_s	56
4.1.6	Procedimento prático	58
4.1.7	Autovalores múltiplos	59
4.1.8	Matrizes simétricas	61
4.1.9	Relação entre os algoritmos QR e LR	61
4.1.10	Convergência do algoritmo LR-Cholesky	62
4.2	Método assemelhado ao de Francis	64
5	Comparação dos métodos e conclusões	66
5.1	Análise comparativa	66
5.1.1	Gráficos comparativos	67
5.1.2	Tabelas comparativas	70
5.2	Conclusões	72
	Referências Bibliográficas	73

Capítulo 1

Introdução

Com o desenvolvimento da teoria quântica nas décadas de 1920 e 1930, o estudo de matrizes tornou-se de grande importância. No final da década de 1940, alguns matemáticos se perguntavam como o computador digital poderia ser empregado para resolver o problema de autovalores de matrizes. A determinação dos autovalores de uma matriz tem merecido grande atenção, devido a sua grande aplicação aos diversos ramos das Ciências Aplicadas, como, por exemplo:

- a teoria das vibrações, quer sejam mecânicas ou elétricas, dos tipos macroscópica ou microscópica;
- as vibrações de pontes ou outra estrutura sólida;
- as vibrações das asas de um avião;
- a análise do insumo-produto, introduzida por Leontief, com sua matriz, que liga indústrias individuais a todo o trabalho da Economia;
- a oscilação de partículas atômicas e moleculares nas ondas mecânicas de Schroedinger;
- a teoria dos operadores lineares diferenciais e integrais, etc...

A obtenção dos autovalores λ de uma matriz quadrada de ordem n envolve cálculos complexos por serem os zeros do polinômio característico $\det(A - \lambda I) = 0$, que é um polinômio de grau n em λ . A busca de soluções para este problema acarretou o desenvolvimento de uma série de algoritmos, os mais diversos, cada vez mais poderosos e mais eficientes. O primeiro a surgir foi o mais óbvio, composto de apenas dois passos. Primeiro, calcula-se os coeficientes do polinômio característico e, então, as raízes desse polinômio.

Embora existam várias maneiras de se realizar o primeiro passo, ainda não existe um algoritmo eficaz para o segundo, ou seja, para matrizes de ordem maior do que 10. Isso porque, em geral, se os coeficientes dos polinômios sofrem pequenas alterações, suas raízes são alteradas. Por outro lado, os autovalores não são alterados se os coeficientes da matriz sofrem pequenas alterações.

Dessa forma, surgiu uma outra alternativa para se calcular os autovalores de uma matriz. Utilizando-se transformações de similaridade, podemos obter uma matriz com vários elementos nulos e que possua os mesmos autovalores da matriz original. Uma matriz diagonal seria perfeita. Porém, se conseguirmos uma matriz triangular já é o suficiente, pois seus autovalores são os elementos da diagonal principal.

Examinaremos, neste trabalho, o problema de obtenção dos autovalores de uma matriz quadrada A , de ordem n , através de transformações de similaridade, que possibilitem a criação de uma seqüência $\{A_k\}$ de matrizes semelhantes, que tendam a uma matriz triangular superior ou diagonal (se A for simétrica), A_∞ , cujos autovalores são os elementos diagonais. Como a seqüência $\{A_k\}$ é constituída de matrizes semelhantes, temos que A e A_∞ são semelhantes e, portanto, possuem os mesmos autovalores, com as mesmas multiplicidades. Assim, a determinação dos autovalores de A resume-se à busca dos elementos da diagonal principal da matriz A_∞ .

Deve-se a Jacobi, em 1846, o início desta linha de pesquisa. A seguir, Givens, em 1954, usando matrizes de rotação de Jacobi, estabeleceu um método para tridiagonalização de matrizes.

Em 1958, Rutishauser publicou um método, atualmente conhecido como algoritmo LR [24], que, utilizando decomposições triangulares, cria uma seqüência de matrizes semelhantes que, sob certas condições, convergem para uma matriz triangular superior ou diagonal, cujos elementos da diagonal principal fornecem os autovalores.

Entretanto, o algoritmo LR tem sua aplicação restrita, pois depende do fato de a matriz dada, bem como cada uma das demais matrizes da seqüência, ser decomponível em LU, onde L é uma matriz triangular inferior com todos os elementos da diagonal principal iguais a 1 e U é triangular superior.

O Teorema de Schur (Teorema 2.8) assegura a existência dessa matriz U que, por ser unitária ($U^* = U^{-1}$), nos permite garantir a semelhança entre A e T . Entretanto, a afirmação da existência dessa matriz não soluciona nosso problema.

Em 1961, Francis [9], utilizando, também, matrizes unitárias, a partir da idéia original de Rutishauser, desenvolveu o algoritmo QR que, atualmente, é considerado como a mais poderosa técnica para a solução do problema de autovalor. Seu método modifica o algoritmo LR quanto à decomposição de cada matriz da seqüência. Ao invés da decomposição triangular (LU), utiliza a decomposição unitária-triangular (QR), onde Q é uma matriz unitária e R triangular superior. Para calcular a matriz Q, Francis utilizou as matrizes de rotação de Jacobi. Dessa maneira, Francis eliminou a restrição da aplicabilidade do processo LR, tornando, sob certas condições, possível a obtenção de seqüência de matrizes similares, como a idealizada por Rutishauser.

Até os dias de hoje, o algoritmo mais utilizado é o algoritmo QR de passo duplo, também desenvolvido por Francis [10]. Porém, em uma tentativa de deixá-lo mais rápido, surgem as variações do algoritmo QR. Por exemplo, o algoritmo QR paralelo, o algoritmo SDC, os algoritmos γ -híbridos, $0 \leq \gamma \leq 1$, e os algoritmos SR e HR.

No algoritmo QR paralelo, apresentado por Kaufman em [15], $\frac{n}{2}$ transformações de similaridade podem ser realizadas simultaneamente. Comparando este com o algoritmo original, o algoritmo paralelo necessita do triplo de iterações do algoritmo original, porém, como as operações são realizadas simultaneamente, o tempo computacional é menor.

Os algoritmos SR [6] e HR [4] são membros da família dos algoritmos GR [27] para calcular os autovalores e espaços invariantes de matrizes. Os algoritmos SR e HR são de grande importância, pois preservam certas características da matriz. O algoritmo SR preserva a propriedade das matrizes hamiltonianas, enquanto que o algoritmo HR mantém a propriedade de matrizes tridiagonais *sign*-simétricas, isto é, matrizes simétricas a menos dos sinais dos elementos. Em um trabalho mais recente, Benner e Faßbender [3] conseguiram demonstrar que os dois algoritmos são equivalentes se tomados os *shifts* adequados.

Em um trabalho conjunto com Demmel e Gu, Bai [2] desenvolveu o algoritmo Spectral Divide and Conquer (SDC), que fora baseado na teoria de Bulgakov, Godunov e Malyshev. Com armazenagem e custo aritmético razoáveis, este algoritmo pode ser aplicado ao problema de autovalor e ao problema generalizado de autovalor.

Haag e Watkins [13] descreveram os algoritmos γ -híbridos que combinam elementos dos algoritmos QR e LR. Além disso, também desenvolveram um algoritmo semelhante ao LR de Rutishauser (ALR). O algoritmo 1-híbrido, com $\gamma = 1$, foi o que apresentou melhor desempenho, chegando a ser 15% mais rápido que o QR.

O objetivo deste trabalho é estudar um método equivalente ao QR de Francis e, portanto, de aplicação mais ampla. Este método difere-se do de Francis pela maneira mais simples e mais eficiente de se obter as matrizes Q_k , $k = 1, 2, \dots$, das decomposições QR. Foi denominado "Método Assemelhado ao de Francis" (MAF) e apresentado por Andrade e Bracciali em [1]. O MAF é mais simples que o de Francis pois utiliza a decomposição de Cholesky para determinar as decomposições $Q_k R_k$ das matrizes A_k , para $k = 1, 2, \dots$. Para isso, em cada estágio k , a matriz $B_k = A_k^t A_k$ é decomposta no produto $R_k^t R_k$ e, assim, $(R_k^t)^{-1} A_k^t A_k = R_k$. Construimos, então, a matriz $Q_k^t = (R_k^t)^{-1} A_k^t$. As matrizes Q_k e R_k obtidas desta forma são as matrizes da decomposição QR da matriz A_k .

Para desenvolver o estudo a que nos propusemos, organizamos esta dissertação da seguinte forma:

No Capítulo 2, apresentamos alguns conceitos e resultados da Álgebra Linear no que diz respeito ao problema de autovalores de matrizes. Podemos dizer que este capítulo servirá de base para os demais.

Nos Capítulo 3, fazemos um estudo sobre o algoritmo LR de Rutishauser. Mostramos sua convergência, eficácia e apresentamos o algoritmo LR modificado, uma alternativa para as matrizes que não possuem decomposição LU.

No Capítulo 4, apresentamos o algoritmo QR de Francis e o MAF, Método Assemelhado ao de Francis, para obtenção dos autovalores de uma matriz. Mostramos suas convergências, eficácia dos métodos e a relação entre os algoritmo QR e LR.

No capítulo 5, apresentamos os resultados e conclusões obtidas dos testes realizados, comparando os algoritmos QR, LR e MAF. Além disso, apresentamos, também, uma das matrizes utilizadas na comparação e as matrizes obtidas com os algoritmos programados.

Capítulo 2

Pré-Requisitos

Neste capítulo, apresentamos algumas definições de matrizes quadradas que desempenham papel importante na Álgebra Linear, tais como as matrizes diagonais, triangulares, ortogonais, definidas-positivas e na forma de Hessenberg. Além disso, consideramos, também, as normas de vetores e matrizes bem como as definições de autovalor e autovetor. Nas seções 2.5 e 2.6, apresentamos as reflexões de Householder e as rotações de Givens, que podem ser encontrados em Hager [14]. Apresentamos, também, as decomposições LU, QR e de Cholesky. Todas as decomposições podem ser encontrados nos livros Lipschutz [19], Rutishauser [25] e Noble [22].

2.1 Espaço vetorial e produto interno

Definição 2.1. Dizemos que um conjunto $V \neq \emptyset$ é um espaço vetorial sobre um conjunto de escalares K se, para quaisquer $u, v, w \in V$ e $\alpha, \beta \in K$,

(I) Existe uma operação adição $V \times V$ em V , $(u, v) \mapsto u + v$, com as seguintes propriedades:

- $u + v = v + u$ (comutativa);
- $(u + v) + w = u + (v + w)$ (associativa);
- Existe um vetor em V , chamado $\mathbf{0}$ ou vetor zero, tal que $u + \mathbf{0} = u$ (elemento neutro);
- Para cada vetor u existe um vetor em V , denotado por $-u$, tal que $u + (-u) = \mathbf{0}$ (oposto).

(II) Está definida uma multiplicação de $K \times V$ em V , o que significa que a cada par (α, u) de $K \times V$ está associado um único elemento de V (que se indica por αu) e, para essa multiplicação, tem-se o seguinte:

- $\alpha(u + v) = \alpha u + \alpha v$;
- $(\alpha + \beta)u = \alpha u + \beta u$;
- $(\alpha\beta)u = \alpha(\beta u)$;
- Existe um elemento de K , denotado por 1 ou escalar unitário, tal que $1u = u$.

Usa-se freqüentemente a notação K^n para denotar o conjunto de todas as n -uplas de elementos de K . Assumiremos que K^n é um espaço vetorial sobre K , onde a adição de vetores e a multiplicação por escalar se definem como

$$\begin{aligned}(a_1, a_2, \dots, a_n) + (b_1, b_2, \dots, b_n) &= (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \dots, a_n + b_n), \\ k(a_1, a_2, \dots, a_n) &= (ka_1, ka_2, \dots, ka_n),\end{aligned}$$

onde $k, a_i, b_i \in K, i = 1, \dots, n$.

Além disso, o vetor zero em K^n é a n -upla $(0, 0, \dots, 0)$ e o negativo de um vetor é: $-(a_1, a_2, \dots, a_n) = (-a_1, -a_2, \dots, -a_n)$.

Definição 2.2. *Seja W um subconjunto de um espaço vetorial V sobre um corpo K . W é um subespaço de V se W é ele próprio um espaço vetorial sobre K em relação à adição de vetores e à multiplicação por escalar.*

Definição 2.3 (Produto Interno). *Seja V um espaço vetorial real. Suponha que a cada par de vetores $u, v \in V$ esteja associado um número real, denotado por $\langle u, v \rangle$. Esta função é chamada produto interno (real) em V se satisfaz às seguintes propriedades:*

1. $\langle au_1 + bu_2, v \rangle = a \langle u_1, v \rangle + b \langle u_2, v \rangle$;
2. $\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$;
3. $\langle u, u \rangle \geq 0$ e $\langle u, u \rangle = 0 \Leftrightarrow u \equiv \mathbf{0}$.

Um espaço vetorial V onde está definido um produto interno é chamado *espaço com produto interno* (real). Como exemplo de um espaço com produto interno temos o $\mathbb{R}^n$, com

$$\langle u, v \rangle = u_1v_1 + u_2v_2 + \dots + u_nv_n,$$

onde $u = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ e $v = (v_1, v_2, \dots, v_n)$, $u_i, v_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, n$, $n > 1$.

2.2 Normas de vetores e matrizes

Definição 2.4. *Seja V um espaço vetorial sobre $\mathbb{R}$ e $x \in V$. Chama-se norma de x , $\|x\|$, qualquer função definida em V , com valores em $\mathbb{R}$, satisfazendo às seguintes condições:*

- i) $\|x\| \geq 0$ e $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x \equiv \mathbf{0}$;
- ii) $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$, para todo escalar $\lambda \in \mathbb{R}$;
- iii) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$, para quaisquer $x, y \in V$ (desigualdade triangular).

Como exemplos de normas no $\mathbb{R}^n$, temos

$$\text{a) } \|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}, \quad \text{b) } \|x\|_p = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^n |x_i|^p}, \quad 0 < p < \infty \quad \text{e} \quad \text{c) } \|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|.$$

De maneira similar, definimos norma de matrizes.

Definição 2.5. *Seja $\mathbb{R}^{m \times n}$ o espaço vetorial das matrizes reais com m linhas e n colunas. Chama-se norma de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\|A\|$, qualquer função definida em $\mathbb{R}^{m \times n}$, com valores em $\mathbb{R}$, satisfazendo às seguintes condições:*

- i) $\|A\| \geq 0$ e $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A \equiv \mathbf{0}$;
- ii) $\|\kappa A\| = |\kappa| \|A\|$, para todo escalar $\kappa \in \mathbb{R}$;
- iii) $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$, para quaisquer $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (desigualdade triangular).

Vejamos alguns exemplos de normas de matrizes:

$$\text{a) } \|A\|_E = \sqrt{\sum_{i,j=1}^{m,n} a_{ij}^2}, \quad \text{b) } \|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \quad \text{e} \quad \text{c) } \|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|.$$

Definição 2.6. *Dada uma norma de vetor no $\mathbb{R}^n$, podemos definir uma norma de matriz, que será subordinada a ela, por*

$$\|A\| = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|.$$

As normas de matrizes assim definidas podem ser interpretadas como sendo o comprimento do maior vetor do conjunto imagem Ax da esfera unitária $\{x, \text{ tal que } \|x\| = 1\}$ pela transformação $x \rightarrow Ax$. Uma norma de matriz subordinada à uma norma de vetor possui a seguinte propriedade:

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\|.$$

Em nosso estudo, vamos considerar apenas as normas subordinadas de matrizes e que satisfazem à propriedade abaixo.

Definição 2.7. *Dada uma norma no $\mathbb{R}^n$ e uma norma de matriz, dizemos que elas são consistentes se, para qualquer $x \in \mathbb{R}^n$,*

$$\|Ax\| \leq \|A\| \|x\|.$$

Note que existe um vetor $x_0 \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$\|Ax_0\| = \|A\| \|x_0\|.$$

2.3 Tipos especiais de matrizes quadradas

Definição 2.8 (Matriz Diagonal). *Uma matriz quadrada $D = (d_{ij})$ é diagonal se os elementos fora da diagonal principal são todos nulos, ou seja, $d_{ij} = 0$ para $i \neq j$.*

Denota-se freqüentemente tais matrizes por $D = \text{diag}(d_{11}, d_{22}, \dots, d_{nn})$. Como exemplo de matrizes diagonais temos $A = \text{diag}(3, -7, 2)$ e $B = \text{diag}(4, 5)$, que também podemos escrever da forma

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & -7 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{pmatrix} 4 & & \\ & 5 & \\ & & \end{pmatrix}.$$

A matriz $I = \text{diag}(1, 1, \dots, 1)$ é chamada *matriz identidade*.

Observamos que a soma, o produto por escalar e o produto de matrizes diagonais são também diagonais. Observe que a operação de multiplicação entre duas matrizes diagonais $n \times n$ quaisquer é comutativa.

Definição 2.9 (Matriz Triangular Superior). *Uma matriz quadrada $A = (a_{ij})$ é chamada triangular superior se todos os elementos abaixo da diagonal principal são nulos, isto é, se $a_{ij} = 0$ para $i > j$.*

Vejamos dois exemplos de matrizes triangulares superiores:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 6 \\ & 6 & 3 \\ & & -9 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{pmatrix} 11 & -4 \\ & 1 \end{pmatrix}.$$

Podemos, agora, apresentar o seguinte teorema para matrizes triangulares superiores:

Teorema 2.1. *Sejam A e B matrizes triangulares superiores. Então,*

- (i) $C = A + B$ é triangular superior, com $c_{ii} = a_{ii} + b_{ii}$, $i = 1, \dots, n$.
- (ii) $C = kA$ é triangular superior, com $c_{ii} = ka_{ii}$, $i = 1, \dots, n$.
- (iii) $C = AB$ é triangular superior, com $c_{ii} = a_{ii}b_{ii}$, $i = 1, \dots, n$.
- (iv) Para qualquer polinômio $f(x)$, a matriz $B = f(A)$ é triangular superior e sua diagonal é dada por $b_{ii} = f(a_{ii})$
- (v) A é inversível se, e somente se, $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, \dots, n$.

Demonstração: Veja Lipschutz [19], página 135.

Analogamente, uma matriz triangular inferior é uma matriz quadrada cujos elementos acima da diagonal principal são todos nulos, isto é, $a_{ij} = 0$ para $i < j$. Para tais matrizes, vale teorema análogo ao Teorema 2.1.

Note que os zeros podem ser omitidos das matrizes diagonais e, também, das matrizes triangulares.

Definição 2.10 (Matriz em Banda). *Se A é uma matriz quadrada, tal que $a_{ij} = 0$ para $|i - j| > m$, onde $2m + 1 < n$, então dizemos que A é uma matriz em banda, com largura da banda igual a m .*

Definição 2.11 (Transposta de uma matriz). *A transposta de uma matriz A , denotada por A^t , é a matriz obtida escrevendo-se as linhas de A , em ordem, como colunas, isto é,*

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}^t = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{m2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

Note que a transposta de um vetor coluna é um vetor linha e vice-versa.

A operação de transposição em matrizes satisfaz às seguintes propriedades:

Teorema 2.2. 1. $(A + B)^t = A^t + B^t$;

2. $(A^t)^t = A$;

3. $(kA)^t = k(A)^t$, $\forall k$;

$$4. (AB)^t = B^t A^t.$$

Demonstração: Veja Lipschutz [19], página 111.

Definição 2.12 (Matriz de Hessenberg). Dizemos que A é uma matriz de Hessenberg se $a_{ij} = 0$ para $i > j + 1$.

A matriz abaixo é um exemplo de matriz de Hessenberg,

$$\begin{pmatrix} 11 & 2 & -2 & 1 \\ 1 & 4 & 3 & -4 \\ 0 & 10 & 7 & 8 \\ 0 & 0 & -1 & 7 \end{pmatrix}.$$

Definição 2.13 (Matriz Simétrica). Uma matriz quadrada $A = (a_{ij})$ é simétrica se $A^t = A$. Equivalentemente, A é simétrica se os elementos simétricos com relação à diagonal principal são iguais, isto é, $a_{ij} = a_{ji}$, para todo j e i .

A matriz A é uma matriz simétrica, onde

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -3 & 5 \\ -3 & 6 & 7 \\ 5 & 7 & -8 \end{pmatrix}.$$

Definição 2.14 (Matriz Anti-Simétrica). Uma matriz quadrada A é anti-simétrica se $A^t = -A$. Equivalentemente, A é anti-simétrica se $a_{ij} = -a_{ji}$, para todo j e i .

Obviamente, os elementos diagonais de uma matriz anti-simétrica devem ser zero, pois $b_{ii} = -b_{ii} \Rightarrow b_{ii} = 0$. Por exemplo,

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 3 & -6 \\ -3 & 0 & 1 \\ 6 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Se A e B são matrizes simétricas, então $A + B$ e kA são simétricas. Porém, AB não é necessariamente simétrica.

Teorema 2.3. Seja A uma matriz quadrada. Então,

- $A + A^t$ é simétrica;

- $A - A^t$ é anti-simétrica e
- $A = B + C$ para alguma matriz simétrica B e alguma matriz anti-simétrica C .

Demonstração: Veja Lipschutz [19], página 136.

Definição 2.15. Uma matriz real A é ortogonal se $AA^t = A^tA = I$.

Note que $A^{-1} = A^t$. Como exemplo de uma matriz ortogonal, temos

$$A = \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 1 & 8 & -4 \\ 4 & -4 & 7 \\ 8 & 1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Teorema 2.4. Seja A uma matriz real. Então, as seguintes afirmações são equivalentes:

- (i) A é ortogonal;
- (ii) As linhas de A formam um conjunto ortonormal e
- (iii) As colunas de A formam um conjunto ortonormal.

Demonstração: Veja Lipschutz [19], página 137.

Observação 2.1. Usaremos a notação $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (ou $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$) quando A for uma matriz real (ou complexa) de ordem n .

Para $n = 2$, temos o seguinte resultado, também demonstrado em Lipschutz [19], página 137

Teorema 2.5. Toda matriz ortogonal 2×2 tem a forma

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \text{ para algum } \theta \text{ real.}$$

Seja $A = (a_{ij}) \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Definimos a matriz $\bar{A} = (b_{ij}) = (\overline{a_{ij}})$, como sendo a matriz conjugada de A .

As operações de transposição e conjugação comutam para qualquer matriz complexa A , isto é, $(\bar{A})^t = \overline{(A^t)}$. Usa-se a notação especial A^H , A^* , para a transposta conjugada de A . Note que se A é real, então $A^H = A^t$. Vejamos, agora, algumas matrizes complexas especiais.

Definição 2.16. Seja $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$

- Se $A^H = A$, então A é uma matriz hermitiana;
- Se $A^H = -A$, então A é uma matriz anti-hermitiana;
- Se $A^H = A^{-1}$, então A é uma matriz unitária.

Definição 2.17 (Matriz Definida-Positiva). Uma matriz quadrada A , de ordem n , é definida-positiva se

$$x^t A x > 0$$

para qualquer vetor $x \neq 0$.

2.4 Autovalores e autovetores

Sejam $K = \mathbb{R}$, ou $K = \mathbb{C}$, e $A \in K^{n \times n}$, isto é,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix},$$

com $a_{ij} \in K$.

Definição 2.18. A matriz

$$A - tI = \begin{pmatrix} a_{11} - t & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - t & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} - t \end{pmatrix},$$

onde I é a matriz identidade de ordem n e t é uma incógnita, é chamada matriz característica de A . O determinante $p(t) = \det(A - tI)$ é um polinômio em t chamado polinômio característico de A . Dizemos, também, que $p(t) = 0$ é a equação característica de A .

Desenvolvendo $p(t) = \det(A - tI)$, obtemos

$$p(t) = (-1)^n t^n + (-1)^{n-1} b_{n-1} t^{n-1} + \dots + b_0,$$

onde b_{n-1} é o traço da matriz A e $b_0 = \det(A)$.

Diz-se que um escalar $\lambda \in K$ é um *autovalor* de A , se existe um vetor não-nulo $v \in K^n$ para o qual

$$Av = \lambda v.$$

Todo vetor que satisfaz a essa relação é, então, chamado um *autovetor* de A com relação ao autovalor λ . Observe que todo vetor múltiplo de v por um escalar também é um autovetor com relação a λ , pois

$$A(kv) = k(Av) = k(\lambda v) = \lambda(kv),$$

onde k é um escalar. O produto Av pode variar o módulo e o sentido do vetor, mas nunca sua direção.

O conjunto E_λ de todos os autovetores associados a λ é um subespaço de K^n , geralmente conhecido como autoespaço de λ . O conjunto de todas as raízes é chamado *espectro* de A e vamos denotar por $\lambda(A)$.

De acordo com a definição acima, os autovalores de A^t são os valores para os quais

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

Como o determinante de uma matriz é igual ao determinante de sua transposta, os autovalores de A^t são os mesmos de A . Os autovetores, em geral, são diferentes. Assim, seja λ_i o autovalor de A^t com relação ao autovetor y_i , ou seja,

$$A^t y_i = \lambda_i y_i. \tag{2.1}$$

Agora, reescrevendo (2.1) da seguinte forma, temos

$$y_i^t A = \lambda_i y_i^t.$$

O vetor y_i é chamado de *autovetor à esquerda* de A com relação ao autovalor λ_i .

Teorema 2.6. *Seja $A \in K^{n \times n}$. Então, as afirmações seguintes são equivalentes:*

- i) Um escalar $\lambda \in K$ é um autovalor de A ;
- ii) A matriz $M = \lambda I - A$ é singular;
- iii) O escalar λ é raiz do polinômio característica $p(t)$ de A .

Demonstração: Veja Lipschutz [19], página 405.

Utilizando o teorema acima, se $p(\lambda)$ é o polinômio característico de uma matriz A de ordem n , então podemos decompô-lo da seguinte maneira:

$$p(\lambda) = (\lambda - \lambda_1)^{n_1} (\lambda - \lambda_2)^{n_2} \dots (\lambda - \lambda_l)^{n_l},$$

onde $l \leq n$, $n_1 + n_2 + \dots + n_l = n$ e λ_i , $i = 1, \dots, l$, são os autovalores de A . A dimensão de E_{λ_i} é chamada de *multiplicidade geométrica* de λ_i e n_i é chamado de *multiplicidade algébrica* de λ_i .

Agora, seja a matriz $A + \sigma I$, onde σ é um escalar qualquer e λ é um autovalor de A com relação ao autovetor v . Assim,

$$(A + \sigma I)v = Av + \sigma v = \lambda v + \sigma v = (\lambda + \sigma)v.$$

Logo, $(\lambda + \sigma)$ é um autovalor de $A + \sigma I$ com relação ao autovetor v .

Definição 2.19. *Uma matriz B é similar, ou semelhante, a uma matriz A se existe uma matriz não-singular P tal que $B = P^{-1}AP$.*

Uma matriz A é diagonalizável se existe uma matriz não-singular P tal que $D = P^{-1}AP$ é uma matriz diagonal, isto é, se A é similar a uma matriz diagonal D . O teorema seguinte caracteriza tais matrizes.

Teorema 2.7. *Uma matriz quadrada A de ordem n é similar a uma matriz diagonal D se, e somente se, A tem n autovetores linearmente independentes. Neste caso, os elementos diagonais de D são os autovalores de A e $D = P^{-1}AP$, onde P é a matriz cujas colunas são os correspondentes autovetores.*

Demonstração: Veja Lipschutz [19], página 406.

Examinaremos, neste trabalho, o problema de obtenção dos autovalores de uma matriz quadrada A , de ordem n , através de transformações de similaridade que possibilitem a criação de uma sequência de matrizes semelhantes, que tendam a uma matriz triangular superior A_∞ . Agora, os resultados abaixo nos garantem que, dado uma matriz A , podemos obter uma matriz triangular superior com os mesmos autovalores de A .

Teorema 2.8 (Teorema de Schur). *Seja $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Então, existem uma matriz unitária*

$U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ e uma matriz triangular $T \in \mathbb{C}^{n \times n}$ tais que $T = U^*AU$. T é da forma

$$T = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1n} \\ 0 & t_{22} & \cdots & t_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & t_{nn} \end{pmatrix},$$

onde os elementos diagonais t_{ii} são autovalores de A .

Teorema 2.9 (Teorema de Schur - para matrizes reais). *Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Então, existem uma matriz unitária $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ e uma matriz bloco triangular $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tais que $T = U^*AU$. T é da forma*

$$T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ 0 & T_{22} & \cdots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & T_{nn} \end{pmatrix},$$

onde os blocos diagonais T_{ii} são 1×1 ou 2×2 . Cada bloco 1×1 é um autovalor real de A e cada bloco 2×2 tem como autovalores um par de autovalores complexos conjugados de A . A matriz U é chamada de matriz dos autovetores e U^t a matriz dos autovetores à esquerda.

A demonstração dos dois Teoremas acima podem ser encontradas em Golub [12], páginas 192 e 193.

Teorema 2.10 (Teorema Espectral). *Seja $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitiana. Então, existem uma matriz unitária $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ e uma matriz diagonal $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tais que $D = U^*AU$. As colunas de U são os autovetores de A e os elementos da diagonal de D são os autovalores de A .*

Demonstração: Seja λ um autovalor de A com relação ao autovetor v . Assim, temos que

$$\begin{aligned} Av = \lambda v &\Rightarrow (Av)^H = (\lambda v)^H \Rightarrow v^H A^H = \bar{\lambda} v^H \Rightarrow v^H A = \bar{\lambda} v^H \Rightarrow \\ &\Rightarrow v^H Av = \bar{\lambda} v^H v \Rightarrow v^H \lambda v = \bar{\lambda} v^H v \Rightarrow \lambda \|v\|_2^2 = \bar{\lambda} \|v\|_2^2 \Rightarrow \lambda = \bar{\lambda} \end{aligned}$$

Logo, todos os autovalores de A são reais. Agora, como A é hermitiana, então de acordo com o Teorema de Schur 2.8,

$$T = U^H AU = U^H A^H U = (U^H AU)^H = T^H.$$

Portanto, T só pode ser uma matriz diagonal. ■

Teorema 2.11 (Decomposição de Jordan). *Seja $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Então, existe uma matriz não-singular $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ tal que*

$$X^{-1}AX = J_A = \text{diag}(J_{m_1}(\lambda_1), \dots, J_{m_l}(\lambda_l)),$$

onde

$$J_{m_i}(\lambda_i) = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_i & 1 \\ & & & \lambda_i \end{pmatrix}$$

é quadrada e de ordem m_i e $m_1 + m_2 + \dots + m_l = n$.

Demonstração: Veja Golub [12], página 197.

A matriz J_A é chamada *forma canônica de Jordan de A* e as matrizes J_{m_i} são chamadas de blocos de Jordan. O número e a dimensão dos blocos de Jordan associados a cada autovalor são únicos, porém a ordem em que eles aparecem na diagonal principal pode se alterar.

Sejam A uma matriz com seis autovalores, sendo $\lambda_1 = \dots = \lambda_5 \neq \lambda_6$, e C sua forma canônica de Jordan, onde

$$C = \begin{pmatrix} J_2(\lambda_1) & & & \\ & J_2(\lambda_1) & & \\ & & J_1(\lambda_1) & \\ & & & J_1(\lambda_6) \end{pmatrix}.$$

Agora, em geral, a matriz $(C - \lambda I)$ é a soma, direta, das matrizes da forma $J_r(\lambda_i - \lambda)$. Os determinantes das sub-matrizes da forma canônica $(C - \lambda I)$ são chamados *divisores elementares* da matriz A . Assim, os divisores elementares de qualquer matriz similar à C são

$$(\lambda_1 - \lambda)^2, (\lambda_1 - \lambda)^2, (\lambda_1 - \lambda) \text{ e } (\lambda_6 - \lambda).$$

Podemos observar que o produto dos divisores elementares de uma matriz é igual ao seu polinômio característico. Quando a forma canônica de Jordan é diagonal, então seus divisores elementares são

$$(\lambda_1 - \lambda), (\lambda_2 - \lambda), \dots, (\lambda_n - \lambda),$$

ou seja, são lineares. Uma matriz com autovalores distintos sempre possui *divisores elementares lineares*, mas, como vimos, se uma matriz possui dois ou mais autovalores iguais, então não podemos afirmar se ela possui, ou não, divisores elementares lineares.

Se uma matriz possui um ou mais divisores elementares *não-lineares*, então a forma canônica de Jordan desta matriz possui pelo menos um bloco com dimensão maior que 1 e, além disso, m autovetores linearmente independente, onde $m < n$. Tais matrizes são chamadas *defectivas*.

Os Teoremas de Gershgorin, das Matrizes Correspondentes e de Sylvester são de fundamental importância para os Capítulos 3 e 4, por isso são apresentados a seguir.

Teorema 2.12 (Teorema de Gerschgorin). *Sejam $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, com $A = (a_{ij})$, e*

$$p'_i = \sum_{j=1}^n |a_{ij}|,$$

onde p'_i representa o somatório de $j = 1, \dots, n$, com $i \neq j$. Então, todos os autovalores de A estão em pelo menos um dos discos

$$\{z : |z - a_{ii}| \leq p'_i\}, \quad i = 1, \dots, n,$$

no plano complexo. Além disso, um conjunto de m discos que não possuem pontos em comum com os $n - m$ discos restantes, possui exatamente m autovalores de A .

Demonstração: Veja Peter [23], página 371

Teorema 2.13 (Teorema das Matrizes Correspondentes). *Sejam A, B e C matrizes tais que $C = AB$, onde C é uma matriz quadrada de ordem n . Assim, o determinante de C é a soma dos produtos de todos menores de ordem n de A com o correspondente menor de mesma ordem de B .*

Demonstração: Veja Gantmacher [11], página 9.

Teorema 2.14 (Teorema de Sylvester). *Sejam A e B matrizes quadradas de mesma ordem. O determinante do produto AB é dado pelo somatório*

$$\sum |A'B'|,$$

onde A' e B' são iguais às matrizes A e B , respectivamente, porém com k colunas trocadas entre si. A troca das k colunas é feita fixando-se as k colunas de A que serão trocadas; dentre essas k colunas, a troca é feita sendo a primeira com a primeira de B , a segunda com a segunda de B , etc. Essas trocas são realizadas até que as k colunas de A tenham sido trocadas com todos os grupos possíveis de k colunas de B .

Demonstração: Veja Muir [21], página 120.

2.5 Reflexões de Householder

Seja $w \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|w\|_2 = 1$. Uma reflexão de Householder é uma matriz da forma

$$H = I - 2ww^t.$$

Por exemplo, se $w^t = \frac{1}{5}(3, 4)^t$, então

$$H = \frac{1}{25} \begin{pmatrix} 7 & -24 \\ -24 & -7 \end{pmatrix}.$$

As matrizes de Householder são simétricas e ortogonais. De fato:

- $H^t = (I - 2ww^t)^t = I - 2ww^t = H$.
- $HH = (I - 2ww^t)(I - 2ww^t) = I - 4ww^t + 4ww^tww^t$. Como $\|w\|_2 = w^tw = 1$, então $HH = I$ e, portanto, $H = H^{-1}$.

Multiplicar uma matriz de Householder por um vetor x é equivalente a refletir o vetor x através do plano perpendicular a w . Vejamos:

$$Hx = (I - 2ww^t)x = x - 2ww^tx = x - 2(w^tx)w.$$

Mas, $(w^tx)w$ é a projeção de x em w .

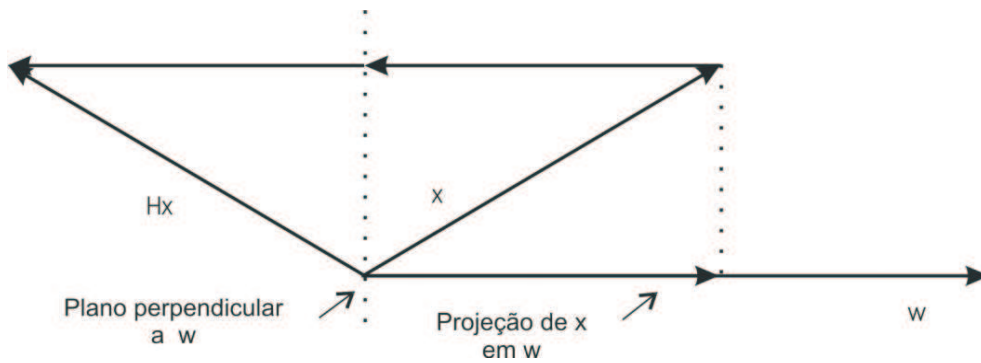


Figura 2.1: Hx é a reflexão de x através do plano perpendicular a w .

Devido a esta propriedade de reflexão, as matrizes de Householder são chamadas reflexões elementares. Vejamos outra propriedade das matrizes de Householder. Sejam x e y vetores não nulos tais que $\|x\|_2 = \|y\|_2 = 1$. Seja

$$w = \frac{1}{\|x - y\|_2} (x - y). \quad (2.2)$$

Então,

$$(I - 2ww^t)x = y.$$

Utilizando (2.2), podemos construir uma matriz de Householder que anula algumas componentes de um vetor x , deixando todas as demais intactas, exceto uma. Assim, dado $k \in \mathbb{Z}, k \geq 1$, vamos construir a matriz de Householder tal que

$$(Hx)_i = \begin{cases} x_i, & i = 1, \dots, k-1, \\ 0, & i = k+1, \dots, n. \end{cases}$$

Considerando (2.2), escolhemos y da seguinte forma:

$$y_1 = x_1, y_2 = x_2, \dots, y_{k-1} = x_{k-1}, y_k = \pm \sqrt{x_k^2 + x_{k+1}^2 + \dots + x_n^2}$$

e $y_{k+1} = \dots = y_n = 0$.

Assim, $\|x\|_2 = \|y\|_2$ e, se escolhermos w como em (2.2), teremos $Hx = y$.

Observe que existem duas possibilidades de sinais para o k -ésimo elemento de y . Se x_k e y_k possuem sinais opostos, então o erro cometido será menor. Por esta razão, podemos considerar

$$w = \frac{1}{\sqrt{2s(s + |x_k|)}} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ x_k + \text{sign}(x_k)s \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

onde $s = \sqrt{x_k^2 + x_{k+1}^2 + \dots + x_n^2}$.

Exemplo 2.1. Considere o vetor $x = (7, 4, 3)^t$. Vamos construir a matriz H que anula a terceira coordenada e mantém a primeira intacta.

Temos $k = 2$ e, então, $s = 5$. Logo,

$$w = \frac{1}{\sqrt{90}} \begin{pmatrix} 0 \\ 9 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad H = -\frac{1}{5} \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & -3 \\ 0 & -3 & 4 \end{pmatrix}.$$

Portanto, obtemos $Hx = y = (7, -5, 0)^t$.

Podemos, também, utilizar as reflexões de Householder para obter duas matrizes similares, sendo que a primeira é dada e a segunda é de Hessenberg. Isto é, se A é uma matriz quadrada, então existe uma matriz H tal que $H^{-1}AH$ é uma matriz de Hessenberg, onde a matriz H pode ser obtida através das reflexões de Householder. Vejamos um exemplo com a matriz

$$A = \begin{pmatrix} 450 & 75 & -525 & 150 \\ 75 & 253 & 380 & -79 \\ 150 & 5 & 325 & -215 \\ 150 & -604 & 160 & 322 \end{pmatrix}.$$

Seja H_1 a matriz que anula o terceiro e quarto elementos da primeira coluna. Assim, utilizando (2.3), temos

$$H_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ 0 & -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$

Fazendo o produto H_1AH_1 , obtemos

$$A_1 = \begin{pmatrix} 450 & 225 & -450 & 225 \\ -225 & 225 & -495 & -90 \\ 0 & 180 & -18 & -126 \\ 0 & 135 & 99 & 693 \end{pmatrix}.$$

Agora, resta apenas anular o quarto elemento da segunda coluna. Para isso, temos

$$H_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.8 & -0.6 \\ 0 & 0 & -0.6 & 0.8 \end{pmatrix},$$

que, ao fazermos o produto $H_2A_1H_2$, obtemos

$$A_2 = \begin{pmatrix} 450 & 225 & 225 & 450 \\ -225 & 225 & -450 & 225 \\ 0 & -225 & 225 & -225 \\ 0 & 0 & -450 & 450 \end{pmatrix}.$$

Podemos ver que

$$A_2 = H_2 H_1 A H_1 H_2 = H^{-1} A H,$$

onde $H = H_1 H_2$.

O algoritmo para reduzir uma matriz quadrada A , com dimensão n , à forma de Hessenberg ocorre de modo análogo. No primeiro passo, construímos a matriz H_1 que anula todos os elementos da primeira coluna, exceto os dois primeiros, e calculamos $A_1 = H_1 A H_1$. No k -ésimo passo, construímos a matriz H_k que anula todos os elementos da k -ésima coluna, exceto os $k + 1$ primeiros, e calculamos $A_k = H_k A_{k-1} H_k$. No passo $n - 2$, obtemos a matriz A_{n-2} na forma de Hessenberg, onde

$$A_{n-2} = H_{n-2} \dots H_1 A H_1 \dots H_{n-2}.$$

Finalmente, $H = H_1 \dots H_{n-2}$.

2.6 Rotações de Givens

Uma rotação de Givens é uma matriz da forma

$$G_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & c & 0 & \dots & 0 & -s \\ & & & 0 & 1 & & & 0 \\ & & & \vdots & & \ddots & & \vdots \\ & & & 0 & & & 1 & 0 \\ & & & s & 0 & \dots & 0 & c \\ & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix},$$

onde a linha com $-s$ é a linha j , a linha com s é a linha i e $c^2 + s^2 = 1$. Note que a intersecção das linhas i e j com as colunas i e j de G_{ij} forma

$$\begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix}.$$

Esta matriz é ortogonal, pois

$$\begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c^2 + s^2 & 0 \\ 0 & c^2 + s^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Podemos concluir, assim, que as matrizes G_{ij} são ortogonais. Essas matrizes são chamadas de rotações pois, se x e y satisfazem

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix},$$

então y é o vetor x girado do ângulo ϕ .

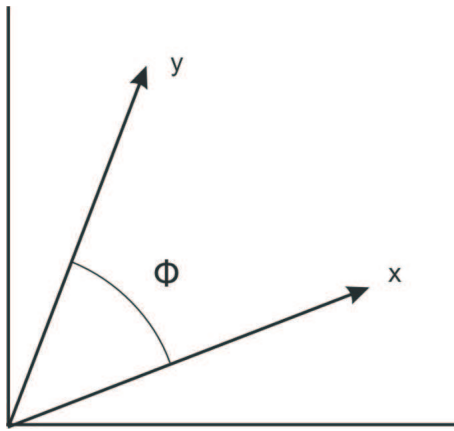


Figura 2.2: Rotação de Givens

Assim, multiplicar um vetor por G_{ij} é equivalente a girar duas componentes do vetor do ângulo $\phi = \arctan\left(\frac{s}{c}\right)$, deixando as demais componentes intactas.

Seja x um vetor com duas componentes e definimos

$$c = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \quad \text{e} \quad s = -\frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}. \quad (2.4)$$

Observe que $c^2 + s^2 = 1$ e

$$\begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Em um trabalho recente, Matioli, juntamente com Biloti e Jin-Yun Yuan, [20] apresentou uma nova transformação, a rotação de Givens generalizada. Essa nova transformação reduz uma matriz quadrada qualquer à forma tri-diagonal sem utilizar as matrizes de Hessenberg.

Além disso, é mais rápida, computacionalmente falando, do que as que utilizam as matrizes de Hessenberg.

Observação 2.2. *As rotações de Givens também podem ser utilizadas para construir uma matriz de Hessenberg similar à uma matriz quadrada qualquer.*

2.7 Eliminação de Gauss e Decomposição LU

Métodos para solução de sistemas de equações lineares são divididos principalmente em dois grupos: 1) Métodos Exatos: são aqueles que forneceriam a solução exata, não fossem os erros de arredondamento, com um número finito de operações e 2) Métodos Iterativos: são aqueles que permitem obter as raízes de um sistema, com uma dada precisão, através de um processo infinito convergente.

A Eliminação de Gauss é um método exato e, ainda hoje, é o método mais utilizado para solução de sistemas de equações lineares. Vejamos um exemplo de sua aplicação no seguinte sistema com 3 equações e 3 variáveis:

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 4 \\ 4x_1 + 7x_2 + 7x_3 = 13 \\ -2x_1 - 7x_2 + 5x_3 = 7 \end{cases} \quad (2.6)$$

Primeiro, eliminamos a variável x_1 da segunda e terceira equações subtraindo duas vezes a primeira equação da segunda e subtraindo -1 vezes a primeira equação da terceira. Obtemos, então um novo sistema linear

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 4 \\ -x_2 + 3x_3 = 5 \\ -3x_2 + 7x_3 = 11 \end{cases} \quad (2.7)$$

Em seguida, eliminamos a variável x_2 da terceira equação subtraindo três vezes a segunda equação da terceira. Chegamos, assim, a uma estrutura triangular:

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 4 \\ -x_2 + 3x_3 = 5 \\ -2x_3 = -4 \end{cases} \quad (2.8)$$

Por último, basta calcular os valores de x_3 , x_2 e x_1 . Obtemos, então,

$$\begin{aligned}x_3 &= \frac{-4}{-2} = 2, \\x_2 &= \frac{5 - 3x_3}{-1} = \frac{5 - 3 \times 2}{-1} = 1, \\x_1 &= \frac{4 - 4x_2 - 2x_3}{2} = \frac{4 - 4 \times 1 - 2 \times 2}{2} = -2.\end{aligned}$$

Agora, utilizando notação matricial, podemos reescrever o sistema (2.6) da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 4 & 7 & 7 \\ -2 & -7 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 13 \\ 7 \end{pmatrix},$$

onde a matriz à esquerda é chamada *matriz dos coeficientes do sistema*, que será denotada por A .

Sejam as matrizes U e L dadas por:

$$U = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -1 & 3 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

A matriz U contém os coeficientes do sistema eliminado (2.8) e a matriz L representa os passos para a eliminação. Durante a eliminação, subtraímos

- 2 vezes a primeira equação da segunda;
- 1 vez a primeira equação da terceira;
- 3 vezes a segunda equação da terceira.

Os fatores de eliminação 2, -1 e 3 são chamados de *pivot*. A matriz A é igual ao produto da matriz L por U :

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

Utilizando esse exemplo, podemos concluir que: *A Eliminação de Gauss de uma matriz A é equivalente a decompô-la no produto de uma matriz triangular inferior, com os elementos da diagonal principal iguais a 1, e uma matriz triangular superior.*

Embora essa afirmação seja verdadeira, apenas um grupo de matrizes possuem decomposição LU. Vejamos o seguinte resultado que caracteriza tais matrizes.

Teorema 2.15. *Sejam A uma matriz real quadrada de ordem n e A_k a matriz menor principal constituída das k primeiras linhas e k primeiras colunas de A . Suponha que $\det(A_k) \neq 0$ para $k = 1, 2, \dots, n-1$. Então, existe uma única matriz triangular inferior L , com $l_{ii} = 1$ para $i = 1, \dots, n$, e uma única matriz triangular superior U tal que $A = LU$. Além disso, $\det(A) = u_{11}u_{22} \dots u_{nn}$.*

Demonstração: Para demonstrar esse teorema, usaremos indução sobre n . Se $n = 1$, temos que $A = (a_{11}) = 1(u_{11}) = LU$ unicamente, e $\det(A) = u_{11}$. Suponhamos que o teorema seja verdadeiro para $n = k-1$. Para $n = k$, particionamos A da seguinte forma:

$$A = \left(\begin{array}{c|c} A_{k-1} & x \\ \hline y & a_{kk} \end{array} \right),$$

onde y é um vetor linha com $k-1$ componentes e x é um vetor coluna com, também, $k-1$ componentes. Escrevendo

$$L = \left(\begin{array}{cc} L_{k-1} & 0 \\ m & 1 \end{array} \right) \quad \text{e} \quad U = \left(\begin{array}{cc} U_{k-1} & p \\ 0 & u_{kk} \end{array} \right),$$

onde m e p são vetores com dimensões apropriadas, temos que

$$LU = \left(\begin{array}{cc} L_{k-1}U_{k-1} & L_{k-1}p \\ mU_{k-1} & mp + u_{kk} \end{array} \right).$$

Agora, pela hipótese de indução, L_{k-1} e U_{k-1} são unicamente determinados e $L_{k-1}U_{k-1} = A_{k-1}$. Além disso, L_{k-1} e U_{k-1} são não-singulares, pois A_{k-1} também é não-singular. Assim, $LU = A$ é equivalente a $L_{k-1}p = x$, $mU_{k-1} = y$ e $mp + u_{kk} = a_{kk}$, ou seja, $p = L_{k-1}^{-1}x$, $m = U_{k-1}^{-1}y$ e $u_{kk} = a_{kk} - mp$. Então, p , m e u_{kk} são determinados univocamente nesta ordem e, assim, L e U também. Finalmente,

$$\det(A) = \det(L)\det(U) = 1\det(U_{k-1})u_{kk} = u_{11}u_{22} \dots u_{nn}.$$

■

Para matrizes que não possuem decomposição LU, podemos fazer uma modificação no algoritmo de forma que seja possível decompô-las no produto LU. Veremos essa alteração na seção 3.1.4.

2.8 Decomposição QR

De maneira similar à decomposição LU, podemos decompor uma matriz A no produto QR , onde Q é uma matriz ortogonal e R é triangular superior.

A decomposição QR de uma matriz A pode ser calculada utilizando-se uma sequência de matrizes de Householder para reduzir A a uma matriz triangular superior. Esta matriz triangular é a matriz R e o produto das matrizes de Householder é a matriz Q . Vejamos o exemplo a seguir.

Exemplo 2.2. Considere a matriz $A = \begin{pmatrix} 10 & 9 & 18 \\ 20 & -15 & -15 \\ 20 & -12 & 51 \end{pmatrix}$.

A primeira coluna de A é $(10, 20, 20)^t$. Assim, usando (2.3) com $k = 1$, temos

$$H_1 = -\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Logo,

$$A_1 = H_1 A = -\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 & 9 & 18 \\ 20 & -15 & -15 \\ 20 & -12 & 51 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -30 & 15 & -30 \\ 0 & -12 & -39 \\ 0 & 9 & 27 \end{pmatrix}.$$

Agora, queremos anular o terceiro elemento da segunda coluna de A_1 . Novamente usando (2.3), mas agora com $k = 2$, obtemos

$$H_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.8 & -0.6 \\ 2 & -0.6 & 0.8 \end{pmatrix}.$$

Assim,

$$A_2 = H_2 A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.8 & -0.6 \\ 0 & -0.6 & 0.8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -30 & 15 & -30 \\ 0 & -12 & -39 \\ 0 & 9 & 27 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -30 & 15 & -30 \\ 0 & 15 & 15 \\ 0 & 0 & 45 \end{pmatrix}.$$

Observe que a primeira coluna de A_2 é igual à primeira de A_1 . Além disso, A_2 é triangular superior e, então, $R = A_2 = H_2 A_1 = H_2 H_1 A$. Portanto, $A = H_1 H_2 R = QR$, onde Q é ortogonal.

A decomposição de uma matriz A qualquer, com dimensão n , ocorre da mesma forma. Primeiro pré-multiplicamos A pela matriz de Householder H_1 que anula todos os elementos da

primeira coluna, exceto o primeiro, e obtemos $A_1 = H_1 A$. Em seguida, calculamos $A_2 = H_2 A_1$ pré-multiplicando A_1 por H_2 , que anula todos os elementos, exceto os dois primeiros, da segunda coluna de A_1 . Após $(n - 1)$ passos, teremos

$$R = A_{n-1} = H_{n-1} A_{n-2} = \cdots = H_{n-1} H_{n-2} \cdots H_1 A.$$

Fazendo $Q = H_1 \cdots H_{n-2} H_{n-1}$, obtemos $A = QR$.

A decomposição QR de uma matriz também pode ser feita através das rotações de Givens. Utilizando (2.4), podemos construir uma rotação de Givens que anula um elemento de uma matriz dada. Para decompormos A no produto QR , multiplicamos A por uma seqüência de rotações de Givens que anula os elementos abaixo da diagonal principal, obtendo, assim, a matriz R triangular superior. Finalmente, Q é o produto das rotações. Vejamos um exemplo.

Exemplo 2.3. Seja $A = \begin{pmatrix} 90 & -153 & 114 \\ 120 & -79 & -223 \\ 200 & -40 & 395 \end{pmatrix}$.

Primeiramente, vamos anular o elemento $a_{21} = 120$. Utilizando (2.4) com $x_1 = 90$ e $x_2 = 120$, obtemos

$$G_{21} = \begin{pmatrix} \frac{90}{150} & \frac{120}{150} & 0 \\ -\frac{120}{150} & \frac{90}{150} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} & 0 \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

que anula a_{21} . Assim,

$$A_{21} = G_{21} A = \begin{pmatrix} 150 & -155 & -110 \\ 0 & 75 & -225 \\ 200 & -40 & 395 \end{pmatrix} = 5 \begin{pmatrix} 30 & -31 & -22 \\ 0 & 15 & -45 \\ 40 & -8 & 79 \end{pmatrix}.$$

Novamente utilizando (2.4), mas agora com $x_1 = 30$ e $x_2 = 40$, temos

$$G_{31} = \begin{pmatrix} 0,6 & 0 & 0,8 \\ 0 & 1 & 0 \\ -0,8 & 0 & 0,6 \end{pmatrix},$$

que anula a_{31} . De fato,

$$A_{31} = G_{31} A_{21} = 25 \begin{pmatrix} 10 & -5 & -10 \\ 0 & 3 & -9 \\ 0 & 4 & 13 \end{pmatrix}.$$

Só nos resta agora anular o elemento a_{32} . Para isso, fazemos

$$G_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0,6 & 0,8 \\ 0 & -0,8 & 0,6 \end{pmatrix} \text{ e } R = G_{32}A_{31} = 125 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Obtivemos então, $R = G_{32}A_{31} = G_{32}G_{31}A_{21} = G_{32}G_{31}G_{21}A$ e, portanto, $A = QR$, onde $Q = (G_{32} G_{31} G_{21})^t$.

Para uma matriz qualquer, anulamos todos os elementos da primeira coluna, exceto o primeiro, com a sequência de rotações $G_{21}, G_{31}, \dots, G_{n1}$. Em seguida, anulamos todos os elementos da segunda coluna, exceto os dois primeiros, com a sequência de rotações $G_{32}, G_{42}, \dots, G_{n2}$. O último passo é anular o elemento $a_{n,n-1}$ com a rotação $G_{n,n-1}$. Finalmente, Q é o produto das matrizes transpostas dessas rotações, nesta mesma ordem. Podemos, agora, demonstrar o seguinte teorema.

Teorema 2.16. *Seja $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Então, existe uma matriz unitária Q tal que $A = QR$, onde R é uma matriz triangular superior com os elementos da diagonal principal reais e não negativos. Além disso, Q é única se A é não-singular.*

Demonstração: A matriz Q pode ser determinada através das reflexões de Householder ou das rotações de Givens, como vimos. Agora, seja A uma matriz tal que

$$A = Q_1 R_1 = Q_2 R_2. \quad (2.9)$$

Se A é não-singular, então R_1 e R_2 também são. Logo,

$$R_1 R_2^{-1} = Q_1^* Q_2 \Rightarrow (R_1 R_2^{-1})^{-1} = (R_1 R_2^{-1})^*.$$

Assim, $R_1 R_2^{-1}$ é uma matriz diagonal. Considerando a diagonal principal dessa matriz, seus elementos são dados por

$$\frac{r_{ii}^{(2)}}{r_{ii}^{(1)}} = \frac{\bar{r}_{ii}^{(1)}}{\bar{r}_{ii}^{(2)}}.$$

Mas, como $r_{ii}^{(1)}$ e $r_{ii}^{(2)}$ são reais e positivos, $r_{ii}^{(1)} = r_{ii}^{(2)}$. Logo,

$$R_1 R_2^{-1} = I \Rightarrow R_1 = R_2.$$

Substituindo em (2.9), temos

$$A = Q_1 R_1 = Q_2 R_1 \Rightarrow Q_1 = Q_2.$$

■

2.9 Decomposição de Cholesky

A decomposição de Cholesky consiste em decompor uma matriz A simétrica e definida-positiva no produto $R^t R$, onde R é uma matriz triangular superior com os elementos na diagonal principal positivos.

Vamos demonstrar esse resultado utilizando indução sobre a dimensão de A . No caso em que $k = 1$, onde k é a dimensão de A , temos

$$A = (a) = (r)(r) = R^t R \Rightarrow r^2 = a.$$

Mas, como a é positivo, podemos escolher r de forma que $r > 0$.

Agora, vamos supor válido para as matrizes de ordem k , para $1 \leq k \leq n - 1$. Assim, se $A = A_n$, onde n é a dimensão de A , é definida-positiva, podemos escrever

$$A_n = \left(\begin{array}{c|c} A_{n-1} & b \\ \hline b^t & a_{nn} \end{array} \right),$$

onde A_{n-1} é a matriz menor principal de ordem $(n - 1)$ formada pelas primeiras $n - 1$ linhas e colunas, que, por hipótese, é simétrica e definida-positiva. Logo, existe uma matriz triangular superior R_{n-1} tal que, $R_{n-1}^t R_{n-1} = A_{n-1}$. É óbvio que R_{n-1} é não-singular, pois $[det(R_{n-1})]^2 = det(A_{n-1})$. Assim, existe um vetor c tal que $R_{n-1}^t c = b$.

Agora, para qualquer valor de x , temos que

$$\left(\begin{array}{c|c} R_{n-1}^t & 0 \\ \hline c^t & x \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} R_{n-1} & c \\ \hline 0 & x \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} A_{n-1} & b \\ \hline b^t & c^t c + x^2 \end{array} \right). \quad (2.10)$$

Portanto, se escolhermos x de forma que $c^t c + x^2 = a_{nn}$, essa é uma decomposição triangular para A_n . Para mostrar que x é real, basta calcular o determinante em (2.10). Assim,

$$[det(R_{n-1})]^2 x^2 = det(A_n) > 0,$$

pois A_n é definida-positiva. Logo, podemos escolher $x > 0$.

Capítulo 3

Algoritmo LR de Rutishauser

Neste capítulo, nosso objetivo é fazer um estudo sobre o Algoritmo LR para o cálculo de autovalores de matrizes. Apresentado por Rutishauser no artigo [24], e por isso leva seu nome, esse algoritmo usa transformações não unitárias para reduzir uma matriz à forma triangular superior. Além do trabalho [24], utilizamos, também, o texto de Wilkinson [30] como referência para o estudo que apresentaremos a seguir.

3.1 Algoritmo LR de Rutishauser

Em 1958, Rutishauser descreveu um processo iterativo para encontrar os autovalores de uma matriz A . O método consiste em formar uma seqüência de matrizes A_s da seguinte forma:

$$\begin{aligned} A_1 &= A, \\ A_s &= L_s R_s, \quad s = 1, 2, \dots, \\ A_{s+1} &= R_s L_s, \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde L_s é uma matriz triangular inferior com todos os elementos da diagonal principal iguais a 1 e R_s é uma matriz triangular superior. Este método de decomposição é o conhecido método LU, como vimos.

De (3.1), podemos escrever $R_s = L_s^{-1} A_s$. Substituindo na expressão para A_{s+1} , obtemos

$$A_{s+1} = L_s^{-1} A_s L_s, \quad s = 1, 2, \dots$$

Logo, as matrizes A_{s+1} e A_s , $s = 1, 2, \dots$, são similares. Como conseqüência, podemos escrever

$$A_{s+1} = L_s^{-1} L_{s-1}^{-1} \dots L_1^{-1} A_1 L_1 \dots L_{s-1} L_s, \quad s = 1, 2, \dots, \tag{3.2}$$

o que demonstra que todas as matrizes A_s , $s = 2, 3, \dots$, são similares a A_1 . Rutishauser mostrou que, sob certas condições,

$$L_s \rightarrow I \text{ e } R_s \rightarrow A_\infty = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \times & \times & \times \\ 0 & \lambda_2 & \times & \times \\ & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}, \text{ quando } s \rightarrow \infty. \quad (3.3)$$

Para demonstrarmos este resultado, vamos reescrever (3.2) da seguinte forma:

$$L_1 \dots L_{s-2} L_{s-1} A_s = A_1 L_1 \dots L_{s-2} L_{s-1}, \quad s = 2, 3, \dots \quad (3.4)$$

Agora, as matrizes T_s e V_s , definidas por

$$T_s = L_1 L_2 \dots L_s \text{ e } V_s = R_s R_{s-1} \dots R_1, \quad (3.5)$$

são, respectivamente, triangular inferior com 1 na diagonal principal e triangular superior. Como

$$\begin{aligned} T_s V_s &= L_1 L_2 \dots L_{s-1} L_s R_s R_{s-1} \dots R_1 \\ &= L_1 L_2 \dots L_{s-1} A_s R_{s-1} \dots R_1, \end{aligned}$$

de (3.4), temos

$$\begin{aligned} T_s V_s &= A_1 L_1 L_2 \dots L_{s-1} R_{s-1} \dots R_1, \\ &= A_1 T_{s-1} V_{s-1} = A_1^2 T_{s-2} V_{s-2}, \quad s = 3, 4, \dots \end{aligned}$$

Continuando dessa forma, obtemos

$$T_s V_s = A_1^s, \quad s = 1, 2, \dots, \quad (3.6)$$

ou seja, $T_s V_s$ é a decomposição LU de A_1^s .

3.1.1 Prova da convergência de A_s

A equação (3.6) é o resultado fundamental para esta análise. Vamos utilizá-la para demonstrar que, se os autovalores de A_1 satisfazem à relação

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|,$$

então, em geral, o resultado (3.3) é verdadeiro. Antes da prova formal, consideremos o caso mais simples de uma matriz de ordem três. Assim, definimos a matriz X dos autovetores à esquerda por

$$X = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \end{pmatrix}$$

e sua inversa Y por

$$X^{-1} = Y = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix}.$$

Então, temos

$$\begin{aligned} F = A_1^s &= X \begin{pmatrix} \lambda_1^s & & \\ & \lambda_2^s & \\ & & \lambda_3^s \end{pmatrix} Y \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1^s x_1 a_1 + \lambda_2^s y_1 a_2 + \lambda_3^s z_1 a_3 & \vdots & \lambda_1^s x_1 b_1 + \lambda_2^s y_1 b_2 + \lambda_3^s z_1 b_3 & \vdots & \lambda_1^s x_1 c_1 + \lambda_2^s y_1 c_2 + \lambda_3^s z_1 c_3 \\ \lambda_1^s x_2 a_1 + \lambda_2^s y_2 a_2 + \lambda_3^s z_2 a_3 & \vdots & \lambda_1^s x_2 b_1 + \lambda_2^s y_2 b_2 + \lambda_3^s z_2 b_3 & \vdots & \lambda_1^s x_2 c_1 + \lambda_2^s y_2 c_2 + \lambda_3^s z_2 c_3 \\ \lambda_1^s x_3 a_1 + \lambda_2^s y_3 a_2 + \lambda_3^s z_3 a_3 & \vdots & \lambda_1^s x_3 b_1 + \lambda_2^s y_3 b_2 + \lambda_3^s z_3 b_3 & \vdots & \lambda_1^s x_3 c_1 + \lambda_2^s y_3 c_2 + \lambda_3^s z_3 c_3 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Agora, $T_s V_s$ é a decomposição LU de A_1^s e, então, os elementos da primeira coluna de T_s são dados por

$$\begin{aligned} t_{11}^{(s)} &= 1, \\ t_{21}^{(s)} &= \frac{\lambda_1^s x_2 a_1 + \lambda_2^s y_2 a_2 + \lambda_3^s z_2 a_3}{\lambda_1^s x_1 a_1 + \lambda_2^s y_1 a_2 + \lambda_3^s z_1 a_3}, \\ t_{31}^{(s)} &= \frac{\lambda_1^s x_3 a_1 + \lambda_2^s y_3 a_2 + \lambda_3^s z_3 a_3}{\lambda_1^s x_1 a_1 + \lambda_2^s y_1 a_2 + \lambda_3^s z_1 a_3}. \end{aligned}$$

Podemos ver que, se $x_1 a_1 \neq 0$,

$$t_{21}^{(s)} = \frac{x_2}{x_1} + O\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^s, \quad t_{31}^{(s)} = \frac{x_3}{x_1} + O\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^s$$

e os elementos de T_s tendem, em geral, aos correspondentes elementos obtidos na decomposição LU de X .

Para os elementos da segunda coluna de T_s , temos

$$\begin{aligned} t_{22}^{(s)} &= 1, \\ t_{32}^{(s)} &= \frac{f_{11} f_{32} - f_{12} f_{31}}{f_{11} f_{22} - f_{12} f_{21}} \\ &= \frac{x_1 y_3 - x_2 y_1}{x_1 y_2 - x_2 y_1} + O\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^s, \end{aligned} \tag{3.7}$$

se

$$(a_1b_2 - a_2b_1)(x_1y_2 - x_2y_1) \neq 0. \quad (3.8)$$

De (3.7), podemos ver que o valor limite de $t_{32}^{(s)}$ é igual ao correspondente elemento obtido na decomposição LU de X . Assim, podemos concluir que se $X = TU$, $x_1a_1 \neq 0$ e $(a_1b_2 - a_2b_1)(x_1y_2 - x_2y_1) \neq 0$, então $T_s \rightarrow T$.

Desta forma, com este simples caso mostramos que a matriz T_s tende à matriz L obtida da decomposição LU da matriz X dos autovetores, desde que os menores principais de X e Y sejam diferentes de zero. Mostraremos, agora, que este resultado vale, em geral, para qualquer matriz com autovalores distintos. Assim, escrevendo

$$T_s V_s = A^s = B,$$

temos que os elementos $t_{ji}^{(s)}$ são dados pelas equações

$$t_{ji}^{(s)} = \frac{\det(B_{ji})}{\det(B_{ii})}, \quad j = 1, \dots, n-1, \quad i = j, \dots, n,$$

onde n é a dimensão da matriz A . Aqui, B_{ii} denota a matriz menor principal formada pelas primeiras i linhas e i colunas de B e B_{ji} é a matriz obtida de B_{ii} substituindo-se a i -ésima linha pela j -ésima linha de B . Da relação

$$B = A^s = X \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} Y,$$

obtemos

$$B_{ji} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{i-1,1} & x_{i-1,2} & & x_{i-1,n} \\ x_{j1} & x_{j2} & \dots & x_{jn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \lambda_1^s y_{11} & \lambda_1^s y_{12} & \dots & \lambda_1^s y_{1i} \\ \lambda_2^s y_{21} & \lambda_2^s y_{22} & \dots & \lambda_2^s y_{2i} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \lambda_n^s y_{n1} & \lambda_n^s y_{n2} & \dots & \lambda_n^s y_{ni} \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Do Teorema das Matrizes Correspondentes (Teorema 2.13), $\det(B_{ji})$ é igual à soma dos produtos dos menores principais de ordem i das duas matrizes à direita em (3.9). Assim, podemos escrever

$$t_{ji}^{(s)} = \frac{\sum x_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(j)} y_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(i)} (\lambda_{p_1} \lambda_{p_2} \dots \lambda_{p_i})^s}{\sum x_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(i)} y_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(i)} (\lambda_{p_1} \lambda_{p_2} \dots \lambda_{p_i})^s}, \quad (3.10)$$

onde $x_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(j)}$ é o menor de ordem i consistindo das linhas $1, 2, \dots, i-1, j$ e colunas $p_1, p_2, \dots, p_i$ de X , e $y_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(i)}$ é o menor de ordem i consistindo das linhas $p_1, p_2, \dots, p_i$ e colunas $1, 2, \dots, i$ de Y . Os termos dominantes no numerador e denominador de (3.10) são aqueles associados à $(\lambda_{p_1} \lambda_{p_2} \dots \lambda_{p_i})^s$ se os correspondentes coeficientes são diferentes de zero. O termo apropriado no denominador é

$$\det(X_{ii}) \det(Y_{ii}) (\lambda_{p_1} \lambda_{p_2} \dots \lambda_{p_i})^s,$$

onde X_{ii} e Y_{ii} são as matrizes menores principais formadas pelas primeiras i linhas e primeiras i colunas de X e Y , respectivamente. Agora, se $\det(X_{ii}) \det(Y_{ii}) \neq 0$, então

$$t_{ji}^{(s)} \rightarrow \frac{\det(X_{ji}) \det(Y_{ii})}{\det(X_{ii}) \det(Y_{ii})} = \frac{\det(X_{ji})}{\det(X_{ii})}, \quad (3.11)$$

o que implica que $T_s \rightarrow T$, onde $X = TU$. De (3.4) e (3.5), temos

$$A_s = T_{s-1}^{-1} A_1 T_{s-1} \rightarrow T^{-1} A_1 T = U X^{-1} A X U^{-1} = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} U^{-1}, \quad (3.12)$$

o que nos mostra que A_s converge para uma matriz triangular superior com λ_i na diagonal principal. Utilizando a relação $L_s = T_{s-1}^{-1} T_s$ e a equação (3.10), podemos mostrar que

$$l_{ji}^{(s)} = O \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right)^s,$$

quando $s \rightarrow \infty$. Assim, da relação $A_s = L_s R_s$ e do fato de R_s convergir para um limite, concluímos que, para $i > j$,

$$a_{ij}^{(s)} = O \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right)^s, \text{ quando } s \rightarrow \infty.$$

Para obter esses resultados, consideramos as seguintes hipóteses:

- (i) todos os autovalores possuem módulos distintos;
- (ii) a decomposição LU de A_s existe para todo s . Existem matrizes em que isto não é possível, como, por exemplo, a matriz

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

Esta matriz possui autovalores iguais a 1 e 3, mas não possui decomposição LU. Note que a matriz $(A + I)$ possuiu decomposição LU e, assim, poderíamos trabalhar com ela normalmente;

(iii) os menores principais de X e Y são diferentes de zero. Existem algumas matrizes onde isto não ocorre. Os exemplos mais triviais são as matrizes da forma

$$\left(\begin{array}{c|c} A_1 & 0 \\ \hline 0 & A_2 \end{array} \right),$$

que claramente mantém esta estrutura em cada estágio s . As matrizes A_1 e A_2 são tratadas independentemente e a matriz limite possui os autovalores de A_1 no canto esquerdo superior e os autovalores de A_2 no canto direito inferior, independentemente de suas dimensões. Consideremos a seguinte matriz 2×2 :

$$\begin{pmatrix} a & \epsilon_1 \\ \epsilon_2 & b \end{pmatrix},$$

onde $|b| > |a|$. Se os ϵ_i são iguais a zero, a matriz permanece inalterada pelo algoritmo LR e a matriz limite não possuiu os autovalores a e b na ordem correta. A matriz dos autovetores é $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ e o seu menor principal de ordem 1 é igual a zero. Agora, se os ϵ_i são diferentes de zero, mas pequenos, então os autovalores estão próximos de a e b . A matriz limite, agora, possui os autovalores na ordem correta, mas sua convergência pode ser lenta, especialmente se a e b não estão próximos.

Neste exemplo, pudemos perceber que as duas metades da matriz podem ser “separadas” quando $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0$ e, se os ϵ_i estão próximos de zero, então as duas metades da matriz possuem o que chamaremos de “ligação fraca”. Como exemplo mais complexo, podemos ter separações iniciais, isto é, quando, para algum i , tivermos $\det(X_{ii})\det(Y_{ii}) = 0$. Mas, erros de arredondamentos no processo LR podem causar “ligação fraca”.

3.1.2 Matrizes hermitianas definidas-positivas

Quando A_1 é uma matriz hermitiana definida-positiva, podemos remover as restrições (i), (ii) e (iii). Temos, agora,

$$A_1 = X \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} X^H,$$

onde X é uma matriz unitária e os λ_i são reais e positivos. Assim, podemos escrever a equação (3.10) como

$$t_{ji}^{(s)} = \frac{\sum x_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(j)} \bar{x}_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(i)} (\lambda_{p_1} \lambda_{p_2} \dots \lambda_{p_i})^s}{\sum |x_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(i)}|^2 (\lambda_{p_1} \lambda_{p_2} \dots \lambda_{p_i})^s}.$$

Considere, agora, a classe dos agrupamentos $p_1 p_2 \dots p_i$ para os quais $x_{p_1 p_2 \dots p_i}^{(i)} \neq 0$. Seja $q_1 q_2 \dots q_i$ um membro desta classe, para o qual $\lambda_{q_1} \lambda_{q_2} \dots \lambda_{q_i}$ assume o valor máximo. O termo dominante no denominador é aquele em que $(\lambda_{q_1} \lambda_{q_2} \dots \lambda_{q_i})^s$. A medida em que o numerador é calculado, sabemos, pela definição dos q_i , que não pode haver termo de ordem maior do que $(\lambda_{q_1} \lambda_{q_2} \dots \lambda_{q_i})^s$ e, assim, este termo deve ter o valor zero como coeficiente. Logo, $t_{ji}^{(s)}$ tende a zero.

Nossa intenção, aqui, é de não fazermos restrições quanto aos menores principais de X e, então, não podemos garantir que o limite T_s é a matriz obtida da decomposição LR de X . Por essa razão, não agimos como em (3.12), mas sim da seguinte forma. Seja

$$T_\infty = \lim_{s \rightarrow \infty} T_s.$$

Então, $L_s = T_{s-1}^{-1} T_s \rightarrow T_\infty^{-1} T_\infty = I$. Desta forma, temos

$$A_s = T_{s-1}^{-1} A_1 T_{s-1} \rightarrow T_\infty^{-1} A_1 T_\infty, \quad (3.13)$$

o que implica que A_s converge para um limite, digamos A_∞ . Agora,

$$R_s = L_s^{-1} A_s \rightarrow I T_\infty^{-1} A_1 T_\infty$$

e, assim, R_s converge para o mesmo limite que A_s . Como R_s é uma matriz triangular para todo s , seu limite é necessariamente uma matriz do mesmo tipo. Esta matriz deve ter os autovalores de A_1 em alguma ordem na diagonal principal, pois, de (3.13), ela é similar a A_1 .

Note que a demonstração não é afetada pela presença de autovalores de mesmo módulo e nem pela existência de algum menor principal de X que seja igual a zero. Porém, os autovalores podem não estar em ordem decrescente de multiplicidade na diagonal de A . Se calcularmos com precisão exata, obteremos uma matriz limite com os autovalores desordenados na diagonal principal. Novamente, há o risco de erros de arredondamento por parte do computador, o que pode causar convergência lenta para uma matriz triangular com os autovalores ordenados.

3.1.3 Autovalores complexos

Quando A_1 é uma matriz real e possui um ou mais pares de autovalores complexos, é óbvio que A_s não pode convergir para uma matriz triangular superior tendo esses autovalores na diagonal principal, pois todas as matrizes A_s são reais. Primeiramente, vamos considerar o caso em que a matriz possui apenas um par de autovalores complexos, digamos λ_{m-1} e $\overline{\lambda_{m-1}}$, e os outros autovalores satisfazem $|\lambda_i| > |\lambda_j|$ se $i < j$. Vamos supor, também, que os menores principais de

X e Y sejam todos diferentes de zero. De (3.10), temos que

$$t_{ji}^{(s)} \rightarrow \frac{\det(X_{ji})}{\det(X_{ii})}, \quad i \neq m-1,$$

exatamente como no caso anterior. Para $i = m-1$, no entanto, existem termos da forma $(\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{m-2} \lambda_{m-1})^s$ e $(\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{m-2} \overline{\lambda_{m-1}})^s$ no numerador e no denominador. Como desejamos estudar o comportamento assintótico desses elementos, é conveniente introduzir uma notação mais simplificada para os menores de ordem $(m-1)$ de X e Y . Assim, sejam

$$z_j = \begin{vmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1,m-1} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2,m-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m-2,1} & x_{m-2,2} & \cdots & x_{m-2,m-1} \\ x_{j1} & x_{j2} & \cdots & x_{j,m-1} \end{vmatrix} \quad \text{e} \quad w_{m-1} = \begin{vmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1,m-1} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2,m-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{m-2,1} & y_{m-2,2} & \cdots & y_{m-2,m-1} \\ y_{m-1,1} & y_{m-1,2} & \cdots & y_{m-1,m-1} \end{vmatrix}.$$

Lembrando que as colunas $(m-1)$ e m de X são complexas conjugadas, assim como as linhas $(m-1)$ e m de Y , então

$$\overline{z_j} = \begin{vmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1,m-2} & x_{1,m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2,m-2} & x_{2,m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{m-2,1} & x_{m-2,2} & \cdots & x_{m-2,m-2} & x_{m-2,m} \\ x_{j1} & x_{j2} & \cdots & x_{j,m-2} & x_{j,m} \end{vmatrix} \quad \text{e} \quad \overline{w_{m-1}} = \begin{vmatrix} y_{11} & y_{12} & \cdots & y_{1,m-1} \\ y_{21} & y_{22} & \cdots & y_{2,m-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{m-2,1} & y_{m-2,2} & \cdots & y_{m-2,m-1} \\ y_{m1} & y_{m2} & \cdots & y_{m,m-1} \end{vmatrix}.$$

Da equação (3.10), obtemos

$$t_{j,m-1}^{(s)} \sim \frac{z_j w_{m-1} (\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{m-1})^s + \overline{z_j} \overline{w_{m-1}} (\lambda_1 \lambda_2 \dots \overline{\lambda_{m-1}})^s}{z_{m-1} w_{m-1} (\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{m-1})^s + \overline{z_{m-1}} \overline{w_{m-1}} (\lambda_1 \lambda_2 \dots \overline{\lambda_{m-1}})^s}, \quad (3.14)$$

que não converge quando $s \rightarrow \infty$. Aqui, o símbolo $\sim$ significa

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \frac{t_{j,m-1}^{(s)}}{\frac{z_j w_{m-1} (\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{m-1})^s + \overline{z_j} \overline{w_{m-1}} (\lambda_1 \lambda_2 \dots \overline{\lambda_{m-1}})^s}{z_{m-1} w_{m-1} (\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{m-1})^s + \overline{z_{m-1}} \overline{w_{m-1}} (\lambda_1 \lambda_2 \dots \overline{\lambda_{m-1}})^s}} = 1.$$

Podemos expressar (3.14) como

$$t_{j,m-1}^{(s)} \sim \frac{a_s z_j + \overline{a_s} \overline{z_j}}{a_s z_{m-1} + \overline{a_s} \overline{z_{m-1}}}$$

e, assim, temos que

$$\begin{aligned} t_{j,m-1}^{(s+1)} - t_{j,m-1}^{(s)} &\sim \frac{(z_{m-1} \overline{z_j} - \overline{z_{m-1}} z_j)(\overline{a_{s+1}} a_s - a_{s+1} \overline{a_s})}{(a_{s+1} z_{m-1} + \overline{a_{s+1}} \overline{z_{m-1}})(a_s z_{m-1} + \overline{a_s} \overline{z_{m-1}})} \\ &= P_s(z_{m-1} \overline{z_j} - \overline{z_{m-1}} z_j). \end{aligned}$$

A diferença entre as colunas $(m-1)$ de T_{s+1} e T_s é, portanto, um múltiplo do vetor com componentes $z_{m-1}\bar{z}_j - \overline{z_{m-1}}z_j$. Aplicando o Teorema de Sylvester (Teorema 2.14) nas expressões de z_j , $\bar{z}_j$, z_{m-1} e $\overline{z_{m-1}}$, obtemos

$$z_{m-1}\bar{z}_j - \overline{z_{m-1}}z_j = (x_{1,2,\dots,m-2})(x_{1,2,\dots,m}^{(j)}).$$

O primeiro fator é independente de j e, então,

$$\lim_{s \rightarrow \infty} t_{jm}^{(s)} = \frac{x_{1,2,\dots,m}^{(j)}}{x_{1,2,\dots,m}^{(m)}}.$$

Logo, podemos escrever

$$t_{j,m-1}^{(s+1)} - t_{j,m-1}^{(s)} \sim Q_s t_{jm}^{(s)}.$$

Demonstramos, assim, que todas as colunas de T_s convergem para um limite, exceto a coluna $(m-1)$. Por último, demonstramos que as colunas $(m-1)$ das matrizes T_{s+1} e T_s diferem por múltiplos da coluna m de T_s . Como $T_{s+1} = T_s L_{s+1}$, concluímos que

$$L_{s+1} \sim \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & c_s & 1 & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix},$$

onde o elemento c_s está na posição $(m, m-1)$. Utilizando a relação $T_{s+1}^{-1} = L_{s+1}^{-1} T_s^{-1}$, temos que todas as linhas de T_s^{-1} tendem a um limite, exceto a linha m . Vimos que a linha m de T_{s+1}^{-1} difere da linha m de T_s^{-1} por um múltiplo, c_s , da linha $(m-1)$. Assim, $A_{s+1} = T_s^{-1} A_1 T_s$ tende para um limite, excetuando-se a linha m e a coluna $(m-1)$. Agora, L_{s+1} é obtida da decomposição LR de A_{s+1} e, do limite de L_{s+1} , temos que todos os elementos abaixo da diagonal principal de A_{s+1} tendem a zero, exceto o da posição $(m, m-1)$, ou algum dos elementos da diagonal de A_{s+1} tende a infinito. Agora, de (3.14), $t_{j,m-1}^{(s)}$ pode ser escrito da forma

$$t_{j,m-1}^{(s)} \sim \frac{M \cos(s\theta + \alpha_j + \beta_{m-1})}{\cos(s\theta + \alpha_{m-1} + \beta_{m-1})}.$$

A não ser que tenhamos $\theta = \frac{d\pi}{e}$, onde d e e são inteiros, a expressão à direita assumirá um valor muito grande. No entanto, será da ordem de M para infinitos valores de s . Assim, podemos excluir a possibilidade dos elementos de A_{s+1} tenderem a infinito.

Podemos estender nossa análise para o seguinte resultado.

Seja A uma matriz real, cujos autovalores estão ordenados da seguinte forma: $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|$. Denotemos um autovalor real por λ_r e um par de autovalores complexos por λ_{c-1} e λ_c , ou seja $\lambda_{c-1} = \overline{\lambda_c}$. Se:

1. $\lambda_i = \lambda_{i+1}$, exceto para os pares conjugados;
2. $\det(X_{ii}) \det(Y_{ii}) \neq 0$, $i = 1, \dots, m$;
3. em cada estágio a matriz A_r pode ser decomposta no produto LU,

então,

- $a_{ij}^{(s)} \rightarrow 0$ se $i > j$, exceto para $a_{c,c-1}^{(s)}$;
- $a_{rr}^{(s)} \rightarrow \lambda_r$;
- todos os elementos $a_{ij}^{(s)}$, $j > i$, tendem para um limite, exceto aqueles que estão na linha c e coluna $c-1$;
- a submatriz $\begin{pmatrix} a_{c-1,c-1}^{(s)} & a_{c-1,c}^{(s)} \\ a_{c,c-1}^{(s)} & a_{c,c}^{(s)} \end{pmatrix}$ não converge, mas seus autovalores convergem para os correspondentes λ_{c-1} e λ_c ;
- os elementos $t_{ij}^{(s)}$ tendem ao limite de (3.11), exceto aqueles da coluna $(c-1)$.

Podemos, agora, utilizar o algoritmo LR como uma técnica prática. À primeira vista pode não parecer tão útil, pois

- (a) Existem matrizes que não possuem decomposição LR, no sentido de que seus problemas de autovalores não são bem condicionados. Sem uma modificação no algoritmo, não podemos calcular seus autovalores através do algoritmo LR. Além disso, existe uma grande classe de matrizes para as quais a decomposição LR é numericamente instável. Podemos ter instabilidade numérica em qualquer passo do processo iterativo, o que nos levaria a uma grande perda de precisão.
- (b) O tempo computacional é muito alto. Existem $\frac{2}{3}n^3$ multiplicações em cada passo de cada iteração, sendo que metade é no processo de triangularização e a outra metade na pós-multiplicação.

- (c) Os elementos abaixo da diagonal principal convergem para zero a uma taxa de $\frac{\lambda_{r+1}}{\lambda_r}$ e será muito devagar se os autovalores forem próximos entre si.

Uma forma de contornar esses problemas no algoritmo LR é através da modificação que definiremos a seguir.

3.1.4 Algoritmo LR modificado

Seja A uma matriz qualquer. Então, existem matrizes $I_{r,r'}$ e N_r tais que

$$N_{n-1}I_{n-1,(n-1)'} \dots N_2I_{2,2'}N_1I_{1,1'}A = R, \quad (3.15)$$

onde todos os elementos de N_r , em valor absoluto, são limitados por 1. As matrizes $I_{r,r'}$ são a matriz identidade com as linhas r e r' trocadas, sendo que r' é definido por

$$|a_{r,r'}^{r-1}| = \max |a_{i,r}^{r-1}|, \quad i = r, \dots, n.$$

Se r' não for único, toma-se o de menor valor.

Podemos completar a transformação de similaridade de A se pós-multiplicarmos R por $I_{1,1'}N_1^{-1}I_{2,2'}N_2^{-1} \dots I_{n-1,(n-1)'}N_{n-1}^{-1}$ e, assim, obter

$$\begin{aligned} N_{n-1}I_{n-1,(n-1)'} \dots N_2I_{2,2'}N_1I_{1,1'}AI_{1,1'}N_1^{-1}I_{2,2'}N_2^{-1} \dots I_{n-1,(n-1)'}N_{n-1}^{-1} &= \\ &= RI_{1,1'}N_1^{-1}I_{2,2'}N_2^{-1} \dots I_{n-1,(n-1)'}N_{n-1}^{-1}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

No caso particular em que não é necessário a troca de linhas, ou seja, $I_{r,r'} = I$, $r = 1, \dots, n-1$, a matriz produto que precede A em (3.15) é a matriz L^{-1} , para a qual $L^{-1}A = R$. Neste caso, a matriz à direita, na equação (3.16), é a matriz RL . Assim, definimos a modificação no algoritmo LR.

Em cada passo s , reduzimos a matriz A_s a uma matriz triangular superior R_s usando eliminação de Gauss com troca de linhas. Em seguida, pós-multiplicamos R_s pelas inversas dos fatores usados na redução. Obtemos, então, a matriz A_{s+1} . O esforço computacional é o mesmo que o do algoritmo LR original.

A fim de evitar uma análise complexa, demonstraremos a relação entre A_1 e A_2 no caso em que $n = 4$. A análise pode ser estendida para o caso geral sem grandes dificuldades. Temos, então,

$$N_3I_{3,3'}N_2I_{2,2'}N_1I_{1,1'}A_1 = R_1$$

e

$$\begin{aligned}
 A_2 &= \{N_3 I_{3,3'} N_2 I_{2,2'} N_1 I_{1,1'}\} A_1 \{I_{1,1'} N_1^{-1} I_{2,2'} N_2^{-1} I_{3,3'} N_3^{-1}\} \\
 &= \{N_3 I_{3,3'} N_2 (I_{3,3'} I_{3,3'}) I_{2,2'} N_1 (I_{2,2'} I_{3,3'} I_{3,3'} I_{2,2'}) I_{1,1'} A_1\} \\
 &\quad \times \{I_{1,1'} (I_{2,2'} I_{3,3'} I_{3,3'} I_{2,2'}) N_1^{-1} I_{2,2'} (I_{3,3'} I_{3,3'}) N_2^{-1} I_{3,3'} N_3^{-1}\},
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

onde os termos entre parênteses são iguais a I . Lembramos que

$$I_{3,3'} I_{2,2'} N_1 I_{2,2'} I_{3,3'} = \tilde{N}_1 \quad \text{e} \quad I_{3,3'} N_2 I_{3,3'} = \tilde{N}_2,$$

onde $\tilde{N}_1$ e $\tilde{N}_2$ são da mesma forma que N_1 e N_2 , mas com os elementos da sub-diagonal reordenados. Reagrupando os termos em (3.17), obtemos

$$A_2 = \tilde{L}_1^{-1} A_1 \tilde{L}_1, \quad \tilde{L}_1 = \tilde{N}_1^{-1} \tilde{N}_2^{-1} \tilde{N}_3^{-1} \quad \text{e} \quad \tilde{A}_1 = I_{3,3'} I_{2,2'} I_{1,1'} A_1 I_{1,1'} I_{2,2'} I_{3,3'}.$$

Podemos ver que $\tilde{L}_1$ é uma matriz triangular inferior com 1 na diagonal principal e $\tilde{A}_1$ é A_1 com suas linhas e colunas permutadas. Se escrevermos

$$I_{3,3'} I_{2,2'} I_{1,1'} = P_1,$$

onde P_1 é uma matriz de permutação, então

$$\tilde{A}_1 = P_1 A_1 P_1^t, \quad P_1 A_1 = \tilde{L}_1 R_1 \quad \text{e} \quad A_2 = R_1 P_1^t \tilde{L}_1 = \tilde{L}_1^{-1} (P_1 A_1 P_1^t) \tilde{L}_1.$$

A prova da convergência do algoritmo LR não se aplica ao algoritmo modificado. No entanto, se houver convergência para uma matriz triangular superior e se nenhum dos autovalores é zero, é óbvio que, a partir de um certo ponto, as trocas de linhas não são mais necessárias, pois os elementos abaixo da diagonal convergem para zero.

Infelizmente, existem matrizes para as quais o algoritmo LR converge e o algoritmo modificado não converge, como é o caso da matriz

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{cujos autovalores são } \lambda_1 = 3, \text{ e } \lambda_2 = -2.$$

Temos

$$A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad A_3 = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = A_1,$$

com uma troca de linhas nas reduções de A_1 e A_2 . Como $A_3 = A_1$, o processo é cíclico e, assim, não converge. Por outro lado, no algoritmo original, a matriz converge com os autovalores na ordem correta.

3.1.5 Matrizes na forma de Hessenberg

Com as observações feitas, pode parecer que o algoritmo LR não é uma boa escolha se A_1 é uma matriz com poucos zeros. Se a matriz A_1 possui a característica de que os elementos nulos são mantidos ao longo do algoritmo, então o número de operações pode ser consideravelmente reduzido.

Existem dois tipos de matrizes com essas características: as de Hessenberg superior, que iremos nos referir apenas como matrizes de Hessenberg, e as matrizes em banda.

Primeiramente, demonstraremos que uma matriz de Hessenberg é invariante com respeito ao algoritmo modificado. No r -ésimo estágio da redução, a escolha do pivot está entre as linhas r e $(r+1)$ e a matriz N_r é igual à matriz identidade exceto na posição $(r, r+1)$, onde o elemento é diferente de zero. Vamos mostrar que a matriz

$$A_2 = R_1 I'_{12} N_{21}^{-1} I'_{23} N_{32}^{-1} \dots I'_{n-1,2} N_{n,n-1}^{-1}$$

é uma matriz de Hessenberg. Aqui, $I'_{r,r+1}$ denota uma matriz na forma $I_{r,r+1}$ ou a matriz identidade, de acordo com a necessidade de troca de linhas ou não no r -ésimo estágio da redução triangular. A prova será feita por indução. Vamos supor que a matriz

$$R_1 I'_{12} N_{21}^{-1} I'_{23} N_{32}^{-1} \dots I'_{r-1,r} N_{r,r-1}^{-1}$$

é uma matriz de Hessenberg nas primeiras $(r-1)$ colunas e triangular superior no restante da matriz. A seguir, mostramos um exemplo com $n=6$ e $r=4$:

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \\ & & & & \times & \end{array} \right).$$

O próximo passo é pós-multiplicá-la por $I'_{r,r+1}$. Se esta matriz for igual a $I_{r,r+1}$, devemos trocar as colunas r e $(r+1)$, caso contrário a matriz não se altera. Logo, a matriz resultante é de uma

das formas (a) ou (b) abaixo:

$$(a) \left(\begin{array}{ccc|ccc} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & & \times & \times & \times \\ & & & \times & 0 & \times \\ & & & & & \times \end{array} \right), \quad (b) \left(\begin{array}{ccc|ccc} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times \\ & & & & & \times \end{array} \right).$$

A pós-multiplicação por $N_{r,r+1}^{-1}$, resulta na adição de um múltiplo da coluna $(r+1)$ à coluna r e, assim, a matriz resultante é de uma das formas (c) ou (d):

$$(c) \left(\begin{array}{cccc|cc} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & & \times & 0 & \times \\ & & & & & \times \end{array} \right), \quad (d) \left(\begin{array}{cccc|cc} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & & \times & \times & \times \\ & & & & & \times \end{array} \right).$$

Em qualquer um desses casos, a matriz é da forma de Hessenberg nas primeiras r colunas e triangular nas demais, o elemento igual a zero em (c) não é importante. Desta forma, a indução está provada.

Para reduzir a matriz à forma triangular, são necessárias $\frac{1}{2}n^2$ multiplicações e outras $\frac{1}{2}n^2$ multiplicações na pós-multiplicação. Temos, assim, n^2 multiplicações em cada iteração do algoritmo LR para matrizes de Hessenberg, enquanto que, para uma matriz qualquer, teríamos $\frac{2}{3}n^3$.

3.1.6 Aceleração da convergência

Vimos que a redução da matriz A à forma de Hessenberg, antes da aplicação do algoritmo, reduz consideravelmente o volume computacional. Porém, o método ainda possui taxa de convergência muito alta

Vimos, também, que, em uma matriz qualquer, os elementos a_{ij} abaixo da diagonal principal convergem para zero com $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^s$ (raramente a convergência é rápida). Para as matrizes de Hessenberg, os únicos elementos diferentes de zero abaixo da diagonal são aqueles nas posições $(r, r-1)$, $r = 2, \dots, n$. Considere, agora, a matriz $(A - \sigma I)$, que possui autovalores $(\lambda_i - \sigma)$ e,

pelo algoritmo LR, $a_{n,n-1}^{(s)}$ tende para zero com $\left(\frac{\lambda_n - \sigma}{\lambda_{n-1} - \rho}\right)^s$. Se σ é uma boa aproximação para λ_n , o elemento $a_{n,n-1}^{(s)}$ converge para zero rapidamente. Então, seria melhor trabalhar com a matriz $(A_s - \sigma I)$ do que com a matriz A .

Observe que se σ é exatamente igual a λ_n , então, se o processo modificado fosse calculado com precisão, o elemento $(n, n-1)$ se tornaria zero em apenas uma iteração. Considerando o processo de triangularização, nenhum dos pivots pode ser igual a zero, exceto o último, pois, em cada estágio da redução, o pivot pode ser $a_{r,r+1}$ ou um outro elemento e, neste caso, estamos supondo que todos os elementos $a_{r,r+1}$ são diferentes de zero. Assim, como $\det(A - \lambda_n I) = 0$, o último pivot tem que ser igual a zero e a matriz R é da forma

$$\begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times \\ & & & & 0 \end{pmatrix},$$

onde a última linha é inteiramente nula. Como a pós-multiplicação apenas combina duas colunas consecutivas, ao fim da iteração devemos obter uma matriz da forma

$$\begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ & & & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

É com o intuito de melhorar a convergência do algoritmo LR que apresentamos a modificação a seguir. No s -ésimo estágio, ao invés de decompormos a matriz A no produto LR, decompomos a matriz $(A_s - k_s I)$, onde k_s é um valor escolhido *a priori*.

Desta forma, produzimos uma seqüência de matrizes da forma

$$A_s - k_s I = L_s R_s \quad \text{e} \quad R_s L_s + k_s I = A_{s+1}.$$

Logo,

$$A_{s+1} = R_s L_s + k_s I = L_s^{-1} (A_s - k_s I) L_s + k_s I = L_s^{-1} A_s L_s \quad (3.18)$$

e, assim, as matrizes A_s são todas similares a A_1 . De fato, de (3.18), temos que

$$A_{s+1} = L_s^{-1} A_s L_s = L_s^{-1} L_{s-1}^{-1} A_{s-1} L_{s-1} L_s = L_s^{-1} \dots L_2^{-1} L_1^{-1} A_1 L_1 L_2 \dots L_s,$$

ou

$$L_1 L_2 \dots L_s A_{s+1} = A_1 L_1 L_2 \dots L_s.$$

Esta forma modificada do algoritmo LR é conhecida como LR com *shifts* na origem. Em programas computacionais, utilizamos a seguinte alteração deste algoritmo:

$$A_s - z_s I = L_s R_s \quad \text{e} \quad R_s L_s = A_{s+1}.$$

Assim,

$$\begin{aligned} A_{s+1} &= R_s L_s = L_s^{-1} (A_s - z_s I) L_s = L_s^{-1} A_s L_s - z_s I \\ &= L_s^{-1} (L_{s-1}^{-1} A_{s-1} L_{s-1} - z_{s-1} I) L_s - z_s I \\ &= L_s^{-1} L_{s-1}^{-1} A_{s-1} L_{s-1} L_s - (z_{s-1} + z_s) I. \end{aligned}$$

Continuando com este raciocínio, obtemos

$$\begin{aligned} A_{s+1} &= L_s^{-1} \dots L_2^{-1} L_1^{-1} A_1 L_1 L_2 \dots L_s - (z_1 + z_2 + \dots + z_s) I \\ &= L_s^{-1} \dots L_2^{-1} L_1^{-1} [A_1 - (z_1 + z_2 + \dots + z_s) I] L_1 L_2 \dots L_s, \end{aligned}$$

o que implica que os autovalores de A_{s+1} diferem dos de A_1 por $\sum_{i=1}^s z_i$.

Voltando ao algoritmo com *shifts* na origem, temos

$$\begin{aligned} L_1 L_2 \dots L_{s-1} (L_s R_s) R_{s-1} \dots R_2 R_1 &= L_1 L_2 \dots L_{s-1} (A_s - k_s I) R_{s-1} \dots R_2 R_1 \\ &= (A_s - k_s I) L_1 L_2 \dots L_{s-1} R_{s-1} \dots R_2 R_1 \\ &= (A_1 - k_s I) (A_1 - k_{s-1} I) L_1 L_2 \dots L_{s-2} R_{s-2} \dots R_2 R_1 \\ &= (A_1 - k_s I) (A_1 - k_{s-1} I) \dots (A_1 - k_1 I). \end{aligned} \tag{3.19}$$

Logo, fazendo

$$T_s = L_1 L_2 \dots L_s \quad \text{e} \quad U_s = R_s \dots R_2 R_1,$$

$T_s U_s$ é a decomposição LR de $\prod_{i=1}^s (A_1 - k_i I)$, sendo que a ordem dos fatores não importa.

Claramente podemos combinar o uso de *shifts* na origem com o uso de trocas de linhas e, assim, cada elemento da sequência de matrizes A_s é similar a A_1 . Porém, não podemos escrever como em (3.19).

Temos, agora, um outro problema, o de encontrar a sequência dos k_s que produzirá convergência mais rápida. Se todos os autovalores possuem módulos distintos, então o elemento $a_{n,n-1}^{(s)}$ converge para zero enquanto que $a_{nn}^{(s)}$ converge para λ_n , podendo, os autovalores, ser

complexos ou reais. Assim, tomamos $k_s = a_{nn}^{(s)}$ se $a_{n,n-1}^{(s)}$ converge para zero ou $a_{nn}^{(s)}$ demonstra sinais de convergência. De fato, podemos ver que, quando $a_{n,n-1}^{(s)}$ é da ordem de ϵ , então, se escolhermos $k_s = a_{nn}^{(s)}$, temos que $a_{n,n-1}^{(s+1)} = O(\epsilon^2)$. Neste caso, com $n = 6$, temos

$$A_s - a_{nn}^{(s)}I = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & \epsilon & 0 \end{pmatrix}.$$

Reduzindo esta matriz à forma LR utilizando eliminação de Gauss com trocas de linhas, obtemos, como último estágio, a seguinte matriz:

$$\begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & a & b \\ & & & & \epsilon & 0 \end{pmatrix}.$$

O elemento a na linha $(n-1)$ não está próximo de zero, a não ser que $a_{nn}^{(s)}$ possua alguma relação especial com o menor principal de ordem $(n-1)$ de A_s . Por exemplo, se $a_{nn}^{(s)}$ é um autovalor deste menor principal, então não é necessária a troca de linha neste último estágio e, assim, $m_{n,n-1} = \frac{\epsilon}{a}$, o que nos fornecerá a matriz

$$\begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & a & b \\ & & & & & -\frac{b\epsilon}{a} \end{pmatrix}.$$

Ao pós-multiplicarmos esta matriz por todos os fatores, exceto $I'_{n-1,n}N_{n,n-1}^{-1}$, a matriz

obtida tomará uma das duas formas abaixo:

$$(a) \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & a & 0 & b \\ & & & & & -\frac{b\epsilon}{a} \end{pmatrix} \quad (b) \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & a & b \\ & & & & & -\frac{b\epsilon}{a} \end{pmatrix}.$$

Se $I'_{n-2,n-1} = I_{n-2,n-1}$, teremos a matriz em (a). Agora, se $I'_{n-2,n-1} = I$, teremos a matriz em (b). Ao pós-multiplicarmos esta matriz pelo fator $I'_{n-1,n} N_{n,n-1}^{-1}$, obtemos

$$(c) \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \frac{b\epsilon}{a} & b \\ & & & & \frac{b\epsilon^2}{a^2} & -\frac{b\epsilon}{a} \end{pmatrix} \quad (d) \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & -\frac{a+b\epsilon}{a} & b \\ & & & & -\frac{b\epsilon^2}{a^2} & -\frac{b\epsilon}{a} \end{pmatrix}$$

Se $I'_{n-1,n} = I_{n-1,n}$, teremos a matriz em (c). Caso contrário, teremos a matriz em (d).

Ao completar o estágio do algoritmo LR com *shift* na origem, obtemos

$$a_{nn}^{(s+1)} = a_{nn}^{(s)} - \frac{b\epsilon}{a}, \quad a_{n,n-1}^{(s+1)} = \frac{b\epsilon^2}{a^2}$$

e, assim, temos que $a_{nn}^{(s)}$ está convergindo e $a_{n,n-1}^{(s+1)}$ é da ordem de ϵ^2 , ou seja, está convergindo para zero. Observe que as trocas de linhas não surtem efeito na convergência.

3.1.7 Deflação de uma matriz

Em geral, quando o elemento $a_{n,n-1}^{(s)}$ se torna pequeno, ele converge para zero rapidamente. Mas, como nem sempre dispomos de precisão exata, dificilmente teremos $a_{n,n-1}^{(s)} = 0$. Assim, ao atingir um valor suficientemente pequeno, o trataremos como zero e diremos que $a_{nn}^{(s)}$ é um autovalor. Os autovalores restantes são os mesmos da matriz formada pelas primeiras $(n-1)$ linhas e colunas. Esta matriz também está na forma de Hessenberg e, assim, podemos continuar com o mesmo método mas, agora, com uma matriz de ordem $(n-1)$. Como esperamos que todos os elementos abaixo da diagonal principal sejam iguais a zero, o elemento $a_{n-1,n-2}^{(s)}$ pode estar bem próximo de zero e, neste caso, podemos usá-lo como nosso próximo k_s .

Continuando com este processo, podemos obter, um a um, todos os autovalores trabalhando sempre com matrizes cada vez menores. Este método é conhecido como *deflação*. O último estágio de convergência de cada autovalor será, geralmente, quadrático e, além disso, imaginamos que, ao encontrar um autovalor, já tenhamos um bom ponto de partida para obtermos o autovalor seguinte.

Este método de deflação é muito estável. De fato, os autovalores serão afetados apenas se forem “sensíveis” ao elementos logo abaixo da diagonal principal. Como supomos que, em geral, a matriz de Hessenberg original A_1 foi obtida da redução de uma matriz A , se os autovalores forem “sensíveis” a estes elementos, então já devemos ter perdido a precisão antes mesmo de começarmos o algoritmo LR. O único perigo adicional é de que a condição sobre A_s possa se perder progressivamente.

3.1.8 *Shift* na origem

A motivação para utilizarmos *shift* na origem é quando temos uma matriz real com autovalores complexos. Neste caso, teremos, como matriz limite, uma matriz bloco triangular, como vimos no Teorema de Schur. Se o autovalor de menor módulo é o de um par complexo, digamos $\lambda \pm i\mu$, então o algoritmo com *shift* na origem deverá tender à uma matriz da forma

$$\left(\begin{array}{ccc|cc} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ \hline & & \epsilon & \times & \times \\ & & & \times & \times \end{array} \right),$$

onde os autovalores da submatriz 2×2 no canto inferior direito convergem para $\lambda \pm i\mu$. Por outro lado, se o autovalor de menor módulo possui módulo igual a λ , deveremos obter uma matriz na forma

$$\left(\begin{array}{cccc|c} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times \\ \hline & & & \epsilon & \times \end{array} \right).$$

Vamos considerar os autovalores da matriz 2×2 nos dois casos. No primeiro caso, os autovalores vão tender para $\lambda \pm i\mu$ como já vimos e, no segundo, o menor dos dois autovalores vai tender

para λ . Vamos analisar este caso.

Para matrizes reais com autovalores também reais, utilizaremos a seguinte escolha para os k_s . Calculamos os autovalores desta matriz 2×2 e, se os autovalores são complexos e iguais a $\gamma_s \pm i\delta_s$, tomamos $k_s = \gamma_s$. Agora, se os autovalores são reais e iguais a γ_s e δ_s , então tomamos $k_s = f_s$, onde $f_s = \min(|\gamma_s - a_{nn}^{(s)}|, |\delta_s - a_{nn}^{(s)}|)$.

Se a matriz original é complexa, então, em geral, teremos dois autovalores complexos α_s e β_s e, novamente, tomaremos k_s como f_s .

Voltando ao caso em que o menor autovalor em módulo é o de um par complexo, esperamos que os autovalores da matriz 2×2 sejam aproximações para este par. Suponha que obtemos como autovalores da matriz 2×2 , o par $\gamma \pm i\delta$. Assim, se nos dois próximos estágios do algoritmo LR utilizarmos, como *shifts*, $\gamma - i\delta$ e, depois, $\gamma + i\delta$, certamente estaremos trabalhando com aritmética complexa, mas, se dispomos de precisão exata, a matriz que obteremos em seguida será real. Vamos denotar essas três matrizes por A_1 , A_2 e A_3 . Logo,

$$A_1 - (\gamma - i\delta)I = L_1 R_1, \quad R_1 L_1 + (\gamma - i\delta)I = A_2,$$

$$A_2 - (\gamma + i\delta)I = L_2 R_2, \quad R_2 L_2 + (\gamma + i\delta)I = A_3.$$

Utilizando o resultado (3.19), temos

$$L_1 L_2 R_2 R_1 = [A_1 - (\gamma - i\delta)I][A_1 - (\gamma + i\delta)I] \quad (3.20)$$

e, obviamente, a matriz à direita é real. Temos, também, que esta matriz é não singular, pois $\gamma \pm i\delta$ não são os autovalores exatos de A_1 e, assim, sua decomposição triangular, se existir, é única e as matrizes L e R são reais. Da equação (3.20), concluímos que $L_3 = L_1 L_2$ e $R_3 = R_2 R_1$. Logo, L_3 é uma matriz real. Utilizando, ainda, o fato de que

$$A_3 = L_3^{-1} A_1 L_3 = (L_1 L_2)^{-1} A_1 L_1 L_2,$$

temos que A_3 é uma matriz real.

Ao executarmos esses dois estágios do algoritmo LR no computador, deveremos obter A_3 com valores imaginários. O processo é numericamente estável, no sentido de que os autovalores de A_3 estão bem próximos dos autovalores de A_1 , mas não temos garantia de que a matriz final obtida esteja próxima da matriz esperada com cálculos exatos.

Capítulo 4

Algoritmo QR de Francis

Fazemos, neste capítulo, um estudo sobre o algoritmo QR. Desenvolvido por Francis em [9], o algoritmo QR utiliza transformações unitárias para reduzir uma matriz à forma triangular superior. Assim como no capítulo anterior, o livro de Wilkinson [30] foi, também, uma referência para o estudo apresentado neste capítulo. Além disso, apresentamos o Método Assemelhado ao de Francis (MAF) e fazemos, também, um estudo sobre a eficiência deste novo método comparado com os algoritmos QR de Francis e LR de Rutishauser. O MAF distingue-se do método de Francis pela maneira mais simples e rápida de se obter as matrizes Q_k e, do de Rutishauser, por se aplicar a classe mais geral de matrizes.

4.1 Algoritmo QR de Francis

Uma outra maneira de se calcular os autovalores de uma matriz A é o algoritmo QR, descrito por Francis [9]. Ao invés de utilizar decomposição triangular, Francis utilizou a decomposição QR. O algoritmo é definido da seguinte forma:

$$\begin{aligned} A_1 &= A, \\ A_s &= Q_s R_s \quad \text{e} \quad A_{s+1} = R_s Q_s, \quad s = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Em cada passo do algoritmo, usamos uma transformação de similaridade com matrizes unitárias. Se A_s é real, então Q_s e R_s são reais. Uma vantagem deste algoritmo, em relação ao algoritmo LR original, é que se A_s possui um menor principal igual a zero, o algoritmo continua funcionando.

As iterações sucessivas satisfazem relações similares àsquelas do algoritmo LR. Vejamos:

$$A_{s+1} = Q_s^H A_s Q_s = Q_s^H Q_{s-1}^H A_{s-1} Q_{s-1} Q_s = Q_s^H \dots Q_2^H Q_1^H A_1 Q_1 Q_2 \dots Q_s$$

e, assim, $Q_1 Q_2 \dots Q_s A_{s+1} = A_1 Q_1 Q_2 \dots Q_s$. Portanto, todas as matrizes A_s são similares a A_1 e, se escrevermos

$$P_s = Q_1 Q_2 \dots Q_s \quad \text{e} \quad U_s = R_s R_{s-1} \dots R_1,$$

então

$$\begin{aligned} P_s U_s &= Q_1 Q_2 \dots (Q_s R_s) R_{s-1} \dots R_1 = Q_1 \dots Q_{s-1} A_s R_{s-1} \dots R_1 \\ &= A_1 Q_1 \dots Q_{s-1} R_{s-1} \dots R_1 = A_1 P_{s-1} U_{s-1}. \end{aligned}$$

Continuando este raciocínio, obtemos

$$P_s U_s = A_1^s$$

e, então, demonstramos que P_s e U_s são as matrizes da correspondente decomposição QR de A_1^s . Como exigimos que os elementos da diagonal principal de R sejam positivos, esta decomposição é única.

4.1.1 Convergência do algoritmo QR

Em geral, as matrizes A_s convergem para uma matriz triangular superior sob menos condições do que as necessárias no algoritmo LR. Mas, antes, vejamos uma diferença entre os dois algoritmos.

Se aplicarmos o algoritmo LR a uma matriz A_1 triangular superior, temos $L_1 = I$, $R_1 = A_1$ e, assim, $A_s = A_1$ para todo s . Agora, se aplicarmos o algoritmo QR a esta mesma matriz, obteremos

$$A_1 = D(D^{-1}A_1) \quad \text{e} \quad A_2 = D^{-1}A_1D,$$

onde $a_{jj} = |a_{jj}|e^{i\theta_j}$ e $D = \text{diag}[e^{i\theta_i}]$. Então, embora A_2 tenha a mesma diagonal principal que A_1 , os elementos acima dela estão multiplicados por fatores complexos de módulo 1. Obviamente, por esta razão, não devemos esperar que A_s convirja para um limite, a não ser que todos os λ_j sejam reais e positivos. Os fatores complexos, de módulo 1, são de pouca importância e, assim, podemos dizer que A_s converge essencialmente se existe alguma matriz diagonal unitária D tal que $A_{s+1} = D^{-1}A_sD$.

4.1.2 Prova formal da convergência

Seja A uma matriz quadrada de dimensão n cujos autovalores satisfazem

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|.$$

Pelo algoritmo QR, temos $A_1 = A$. Como A_1 possui divisores lineares (autovalores diferentes), podemos escrever

$$A_1^s = XD^sX^{-1} = X \begin{pmatrix} \lambda_1^s & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n^s \end{pmatrix} Y.$$

Sejam as matrizes Q , R , L e U de forma que

$$X = QR \quad \text{e} \quad Y = LU,$$

onde R e U são triangulares superiores, L triangular inferior com 1 na diagonal principal e Q é unitária. Note que:

1. as quatro matrizes não dependem de s ;
2. a não singularidade de R segue de X ;
3. a decomposição QR sempre existe, mas a decomposição LU de Y existe apenas se todos os menores principais formados pelas k primeiras linhas e k primeiras colunas, $k = 1, \dots, n-1$, são diferentes de zero.

Temos, então,

$$A_1^s = QRD^sLU = QR(D^sLD^{-s})D^sU. \quad (4.1)$$

Observe que D^sLD^{-s} é uma matriz triangular inferior com 1 na diagonal principal:

$$\begin{aligned} D^sLD^{-s} &= \begin{pmatrix} \lambda_1^s & & & \\ & \lambda_2^s & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n^s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda_1^s} & & & \\ & \frac{1}{\lambda_2^s} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{\lambda_n^s} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1^s & 0 & \cdots & 0 \\ \lambda_2^s l_{21} & \lambda_2^s & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \lambda_n^s l_{n1} & \lambda_n^s l_{n2} & \cdots & \lambda_n^s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\lambda_1^s} & & & \\ & \frac{1}{\lambda_2^s} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \frac{1}{\lambda_n^s} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^s l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^s l_{n1} & \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_2}\right)^s l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Assim, podemos escrever $D^s L D^{-s} = I + E_s$, onde $E_s \rightarrow \mathbf{0}$ quando $s \rightarrow \infty$.

Da equação (4.1), temos

$$A_1^s = QR(I + E_s)D^s U = Q(I + RE_s R^{-1})RD^s U = Q(I + F_s)RD^s U, \quad (4.2)$$

onde F_s é uma matriz estritamente triangular e, além disso, $F_s = RE_s R^{-1}$. Mostremos que $F_s \rightarrow \mathbf{0}$ quando $s \rightarrow \infty$. Como o elemento (i, j) de F_s satisfaz

$$(F_s)_{i,j} = \sum_{k=1}^n (RE_s)_{ik} (R^{-1})_{kj} = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n R_{il} (E_s)_{lk} (R^{-1})_{kj},$$

fazendo $s \rightarrow \infty$, temos que $(F_s)_{ij} \rightarrow 0$, pois $(E_s)_{lk} \rightarrow 0$ para $l, k = 1, \dots, n$.

Agora, podemos escrever

$$I + F_s = \tilde{Q}_s \tilde{R}_s.$$

Como $F_s \rightarrow \mathbf{0}$ quando $s \rightarrow \infty$, temos que $\tilde{Q}_s \tilde{R}_s \rightarrow I$. Além disso, $\det(I + F_s) = 1$ e, então, $\tilde{R}_s$ é inversível e $\det(\tilde{R}_s) = 1$ para todo s .

De (4.2), obtemos

$$A_1^s = (Q \tilde{Q}_s)(\tilde{R}_s R D^s U). \quad (4.3)$$

A matriz do primeiro parênteses é unitário, enquanto que, a do segundo, é triangular superior. Como A_1^s é não-singular, sua decomposição é única e, desta forma, temos que P_s e Q são possivelmente diferentes por uma pós-multiplicação por uma matriz diagonal unitária. Assim, podemos dizer que $P_s \rightarrow Q$. Se insistirmos, ainda, que todas as matrizes R_s devem ter elementos positivos na diagonal principal, podemos encontrar a decomposição unitária diagonal de (4.3). Sejam $D = |D|D_1$ e $U = D_2(D_2^{-1}U)$, onde D_1 e D_2 são matrizes unitárias diagonais, $D_2^{-1}U$ possui os elementos da diagonal principal positivos ($\tilde{R}_s$ e R já possuem elementos positivos na diagonal principal) e $|D|$ é a matriz D com os elementos tomados em módulo. Assim, de (4.3), temos

$$A_1^s = Q \tilde{Q}_s D_2 D_1^s [(D_2 D_1^s)^{-1} \tilde{R}_s R (D_2 D_1^s) |D|^s (D_2^{-1}U)].$$

A matriz entre colchetes é triangular superior com os elementos da diagonal principal positivos e, como $P_s \sim Q D_2 D_1^s$, temos que $Q_s \rightarrow D_1$, pois

$$P_s = Q_1 Q_2 \dots Q_{s-1} Q_s = P_{s-1} Q_s \quad \text{e, portanto,} \quad Q_s = P_{s-1}^* P_s.$$

Logo,

$$Q_s \sim (D_1^{s-1})^* D_2^* Q^* Q D_2 D_1^s = (D_1^{s-1})^* D_1^{s-1} D_1 = D_1.$$

4.1.3 Autovalores desordenados

Demonstramos até agora que, se os menores principais de Y são diferentes de zero, além da convergência, temos, também, que os λ_i da diagonal principal estão ordenados como gostaríamos. É óbvio que se um menor principal de X for igual a zero, ainda assim P_s converge para um limite. Apresentaremos, agora, uma demonstração para o caso em que existem menores principais de Y , formados pelas primeiras i linhas e i colunas, iguais a zero.

Embora Y não possua decomposição LR quando um de seus menores principais é igual a zero, sempre existe uma matriz de permutação P tal que PY possui decomposição LR. Uma forma de se determinar P é utilizando a técnica de pivoteamento. Na eliminação de Gauss, em cada estágio, tomamos como pivot o maior elemento em módulo da coluna em questão. Ao invés disso, no estágio r , escolhemos como pivot o primeiro elemento diferente de zero dentre os elementos das posições $(r, r), (r+1, r), \dots, (n, r)$. Denotemos esta posição por (r', r) . Em seguida, rearranjamos as linhas na ordem $r', r, r+1, \dots, r'-1, r'+1, \dots, n$. Finalmente, temos

$$PY = LR,$$

onde L possui zeros abaixo da diagonal principal nas posições relacionadas à matriz de permutação. Como Y é não-singular, sempre vai existir um pivot em cada estágio. Assim, podemos escrever

$$A_1^s = XD^sY = XD^sP^tLU = XP^t(PD^sP^t)LU.$$

A matriz PD^sP^t é uma matriz diagonal com os elementos λ_i^s em uma ordem diferente, enquanto XP^t é obtida de X através da permutação de suas colunas. Se escrevermos, ainda,

$$XP^t = QR \text{ e } PD^sP^t = D_3^s,$$

então

$$A_1^s = QRD_3^sLU = QR(D_3^sLD_3^{-s})D_3^sU.$$

Como os elementos λ_i^s não estão na ordem natural em D_3 , é natural pensarmos que a matriz $D_3^sLD_3^{-s}$ não convergirá para a matriz identidade. Porém, se denotarmos os elementos da diagonal de D_3 por $\lambda_{i_1}, \lambda_{i_2}, \dots, \lambda_{i_n}$, então o elemento (p, q) , $p > q$, de $D_3^sLD_3^{-s}$ é $\left(\frac{\lambda_{i_p}}{\lambda_{i_q}}\right)^s l_{pq}$ e o pivoteamento em Y garante que $l_{pq} = 0$ quando $i_p < i_q$. Então, podemos escrever $D_3^sLD_3^{-s} = I + E_s$, onde $E_s \rightarrow \mathbf{0}$ quando $s \rightarrow \infty$. A matriz P_s converge essencialmente para a matriz Q , obtida da decomposição de XP^t .

4.1.4 Autovalores de mesmo módulo

Vamos considerar, agora, o caso em que A_1 possui alguns autovalores de mesmo módulo, mas com todos os divisores elementares lineares. Além disso, vamos supor que todos os menores principais de Y sejam diferentes de zero, pois já analisamos seu efeito. Temos, então,

$$A_1^s = XD^sLU.$$

Suponhamos que $|\lambda_r| = |\lambda_{r+1}| = \dots = |\lambda_t|$ e todos os demais autovalores são diferentes em módulo. O elemento (i, j) de D^sLD^{-s} , abaixo da diagonal principal, é $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^s l_{ij}$ e, então, converge para zero a não ser que

$$t \geq i > j \geq r. \quad (4.4)$$

Neste caso, o módulo do elemento é igual a l_{ij} . Se todos os autovalores de mesmo módulo são iguais, então podemos escrever

$$D^sLD^{-s} = \hat{L} + E_s,$$

onde $E_s \rightarrow \mathbf{0}$ quando $s \rightarrow \infty$, $\hat{L}$ é uma matriz triangular inferior fixa com 1 na diagonal principal e igual à matriz I exceto nos elementos (i, j) que satisfazem à relação (4.4), onde são iguais a l_{ij} . Escrevendo $X\hat{L} = QR$, temos

$$A_1^s = QR(I + \hat{L}^{-1}E_s)D^sU = Q(I + R\hat{L}^{-1}E_sR^{-1})RD^sU = Q(I + \hat{F}_s)RD^sU,$$

onde $\hat{F}_s = R\hat{L}^{-1}E_sR^{-1} \rightarrow \mathbf{0}$ quando $s \rightarrow \infty$. Assim,

$$A_1^s = (Q\hat{Q}_s)(\hat{R}_sRD^sU),$$

onde $\hat{Q}_s\hat{R}_s$ é a decomposição QR de $(I + \hat{F}_s)$. Então, a menos de uma pós-multiplicação por uma matriz diagonal unitária, P_s converge para Q , a matriz obtida da decomposição de $X\hat{L}$. Note que as colunas de $X\hat{L}$ formam um conjunto de autovetores de A_1 linearmente independentes, que difere de X apenas nas colunas $r, r+1, \dots, t$, que são substituídas por uma combinação linear dessas colunas. Portanto, autovalores com multiplicidade algébrica maior que 1 não evitam a convergência do algoritmo.

Se os autovalores de mesmo módulo não são iguais, então a matriz $\hat{L}$ é da mesma forma que antes, mas, agora, os elementos diferentes de zero abaixo da diagonal principal não são fixos. Se $\lambda_j = |\lambda_j|e^{i\theta_j}$, temos

$$\hat{l}_{jk} = l_{jk}e^{is\theta_j - \theta}.$$

A matriz $X\hat{L}$ é fixa, exceto nas colunas de r a t . Para cada valor de s essas colunas consistem de uma combinação linear das correspondentes colunas de X . Então, a matriz Q da decomposição QR de $X\hat{L}$ possui todas as colunas fixas exceto as colunas de r a t , que consistem de uma combinação das colunas de r a t da matriz Q_x , onde $X = Q_x R_x$ é a decomposição QR de X . Assim, exceto pelas colunas de r a t , P_s é essencialmente convergente.

O caso mais importante é o de uma matriz real com alguns autovalores reais e outros complexos. Assim, como na subseção (3.1.3), podemos mostrar que A_s converge essencialmente para uma matriz triangular superior, exceto para um único elemento não nulo abaixo da diagonal principal, associado a um par de autovalores complexos. Cada um desses elementos está associado a uma matriz 2×2 centrada na diagonal e com autovalores que convergem para o par de autovalores complexos ao qual esta sub-matriz está associada.

Quando temos r autovalores complexos de mesmo módulo, então, no limite, A_s contém uma submatriz de ordem r centrada na diagonal principal, com autovalores que convergem para esses r valores. Como exemplo, vejamos a matriz abaixo:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Aplicando o algoritmo QR, obtemos

$$Q_1 = A_1, R_1 = I \text{ e } A_2 = R_1 Q_1 = A_1,$$

que possui, como autovalores, $\lambda_j = e^{i\frac{j\pi}{2}}$, $j = 0, 1, 2, 3$. O processo se torna invariante e, então, temos uma submatriz 4×4 centrada na diagonal principal. Tais blocos podem ser difíceis de serem detectados por um processo automático, principalmente se não sabemos sua dimensão.

4.1.5 Decomposição de A_s

Seja A_1 uma matriz na forma de Hessenberg com elementos da sub-diagonal diferentes de zero. Sabemos que esses elementos tendem a zero. Assim, em alguma iteração, podemos ter A_s com um ou mais elementos da sub-diagonal suficientemente pequenos em módulo, a ponto de podermos

substituí-los por zero. Dessa forma, podemos separar a matriz em duas

$$A_s = \left(\begin{array}{cc|ccc} \times & \times & & \times & \times & \times \\ \times & \times & & \times & \times & \times \\ \hline & \epsilon & & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} B & C \\ \hline 0 & D \end{array} \right),$$

ou seja, se ϵ é suficientemente pequeno, então podemos encontrar os autovalores de D e B . Note que a matriz C não altera os autovalores.

Assim, em cada iteração, podemos analisar os elementos da sub-diagonal e, se encontrarmos algum elemento da ordem de ϵ na posição $(r+1, r)$, podemos continuar iterando com a matriz de ordem $(n-r)$ do canto direito inferior até encontrarmos todos os autovalores desta matriz. Em seguida, fazemos o mesmo para a matriz do canto esquerdo superior. Se $r = n-1$, então o elemento na posição (n, n) é um autovalor de A_1 . Em seguida, podemos eliminar a última linha e a última coluna de A_s e trabalhar com a matriz de ordem $(n-1)$.

Em 1961, Francis propôs uma extensão deste algoritmo. Seja A uma matriz de Hessenberg com os elementos das posições $(r+1, r)$ e $(r+2, r+1)$ suficientemente pequenos em módulo, ϵ_1 e ϵ_2 . Vejamos um exemplo com $n = 6$ e $r = 2$. Tomemos

$$A = \left(\begin{array}{cc|cccc} \times & \times & & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & & \times & \times & \times & \times \\ \hline & \epsilon_1 & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \epsilon_2 & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times & \times \\ & & & & & \times & \times \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} X & Y \\ \hline E & W \end{array} \right),$$

onde E é uma partição nula de A exceto pelo elemento ϵ_1 . Vamos mostrar que, se μ é um autovalor de W , então também é um autovalor da matriz A' , onde A' difere de A apenas pelo elemento $\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{(a_{r+1, r+1} - \mu)}$ na posição $(r+2, r)$.

Como $(W - \mu I)$ é singular, existe um vetor $x \neq 0$ tal que $x^t(W - \mu I) = 0$. As duas primeiras componentes de x satisfazem $(a_{r+1, r+1} - \mu)x_1 + \epsilon_2 x_2 = 0$ e, assim, $\epsilon_1 x_1 + \left(\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{a_{r+1, r+1} - \mu} \right) x_2 = 0$. Desta forma, temos que as últimas $(n-r)$ linhas de $(A' - \mu I)$ são linearmente dependentes, ou seja, μ é um autovalor de A' . Se $\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{a_{r+1, r+1} - \mu}$ está próximo de zero, então μ é, com certeza, um autovalor de A . Logo, se $(a_{r+1, r+1} - \mu)$ não está próximo de zero, podemos separar W do resto da matriz.

Podemos ver este resultado na matriz a seguir

$$A_1 = \left(\begin{array}{c|c} X & Y \\ \hline E & W \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc|cccc} 4 & 3 & 2 & 1 & 5 & 6 \\ 3 & 1 & 4 & 2 & 1 & 7 \\ \hline & 10^{-5} & 6 & 1 & 5 & 3 \\ & & 10^{-5} & 2 & 5 & 7 \\ & & & 1 & 2 & 3 \\ & & & & 4 & 1 \end{array} \right)$$

Essa matriz possui elementos 10^{-5} nas posições $(3, 2)$ e $(4, 3)$. Os autovalores de W são $\mu_1 = -0.4641031621$, $\mu_2 = -0.9999985714$, $\mu_3 = 6.4641231611$ e $\mu_4 = 5.9999785724$. Como apenas μ_4 está próximo de a_{33} podemos esperar que a matriz A_1 tenha os autovalores λ_1 , λ_2 e λ_3 diferindo de μ_1 , μ_2 e μ_3 , respectivamente, por valores da ordem de 10^{-10} . Já o autovalor λ_4 difere de μ_4 por um valor da ordem de 10^{-5} . Os autovalores λ_5 e λ_6 de A_1 não alteram os demais autovalores.

4.1.6 Procedimento prático

Podemos tirar proveito deste fenômeno agindo da seguinte forma. Ao final de cada iteração, determinamos o *shift* k_s a ser utilizado na próxima iteração. Em seguida, testamos se a condição

$$\frac{a_{r+1,r}^{(s)} a_{r+2,r+1}^{(s)}}{a_{r+1,r+1}^{(s)} - k_s} < 2^{-t} \|A_1\| \quad (4.5)$$

é satisfeita para $r = 1, 2, \dots, n-1$ e denotamos por p o maior valor de r para o qual a expressão é verdadeira. O próximo passo consiste em triangularizar a matriz $(A_s - k_s I)$ a partir da linha $(p+1)$. Obtemos, assim, o elemento $\epsilon_2 = \frac{a_{p+1,p}^{(s)} a_{p+2,p+1}^{(s)}}{a_{p+1,p+1}^{(s)} - k_s}$ na posição $(p+2)$. Este elemento deve estar bem próximo de zero. Ao final desta triangularização parcial, obtemos uma matriz como no exemplo abaixo, em que $n = 6$ e $p = 2$:

$$\left(\begin{array}{cc|cccc} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \hline & \epsilon_1 & \times & \times & \times & \times \\ & \epsilon_2 & 0 & \times & \times & \times \\ & & & 0 & \times & \times \\ & & & & 0 & \times \end{array} \right).$$

As primeiras p linhas não se alteram. Em seguida, completamos a transformação de similaridade. Para isso, utilizamos operações apenas nas colunas de $(p + 1)$ até n . Se as condições forem satisfeitas em (4.5), então também serão nas iterações subseqüentes.

Este processo também pode ser aplicado ao algoritmo LR com troca de linhas.

4.1.7 Autovalores múltiplos

Vimos, em (4.1.4), que autovalores múltiplos correspondentes a divisores lineares não afetam desfavoravelmente a convergência do algoritmo QR. Vejamos, agora, o seguinte caso. Seja A_1 uma matriz que possui, como divisores elementares, $(\lambda - a), (\lambda - a)$ e $(\lambda - b)$, onde a e b são aproximadamente 1 e 3. Suponha que, em alguma iteração, A_r é dada por

$$A_r = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ \epsilon_1 & 1 & 2 \\ \epsilon_2 & \epsilon_3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Calculando A_{r+1} através do algoritmo LR, ou QR, obtemos

$$A_{r+1} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ \frac{1}{3}\epsilon_1 + \frac{2}{3}\epsilon_2 & 1 & 2 \\ \frac{1}{3}\epsilon_3 & \epsilon_3 + \frac{1}{3}\epsilon_2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Podemos ver que o elemento $(3, 2)$ está aumentando. A idéia errada nesse argumento é que, se A_1 possui divisores lineares, então não podemos obter tal A_r através de A_1 . O posto de $(A - aI)$ é 1 e, assim, no exemplo, acima temos que o elemento $(2, 3)$ deve satisfazer à relação $(3 - a)a_{23} - 2\epsilon_1 = 0$. Logo, $a_{23} \sim \epsilon_1$. Se levarmos em consideração as relações que devem existir entre os elementos de A_r , verifica-se que os elementos abaixo da diagonal principal estão, de fato, diminuindo por um fator de cerca de $\frac{1}{3}$ a cada iteração.

Se A_1 possui divisores não-lineares, em geral, o algoritmo LR não converge para uma matriz triangular superior. Assim, a matriz

$$A_1 = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 1 & a & 0 \\ 0 & 1 & a \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

permanece dessa forma com relação ao algoritmo LR original e, se $|a| > 1$, então ela também não se altera com relação ao algoritmo LR com troca de linhas.

No entanto, o algoritmo QR converge para qualquer matriz que possua, como forma de Jordan, a matriz A_1 em (4.6). Vejamos:

$$A_1 = X \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 1 & a & 0 \\ 0 & 1 & a \end{pmatrix} Y = X J Y, \quad A_1^s = X \begin{pmatrix} a^s & 0 & 0 \\ \begin{pmatrix} s \\ 1 \end{pmatrix} a^{s-1} & a^s & 0 \\ \begin{pmatrix} s \\ 2 \end{pmatrix} a^{s-2} & \begin{pmatrix} s \\ 1 \end{pmatrix} a^{s-1} & a^s \end{pmatrix} Y$$

e, assim, se $Y = LU$, então

$$A_1^s = X \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} K_s U,$$

onde

$$K_s = \left(\begin{array}{c|c|c} \begin{pmatrix} s \\ 2 \end{pmatrix} a^{s-2} + \begin{pmatrix} s \\ 1 \end{pmatrix} l_{21} a^{s-1} + l_{31} a^s & \begin{pmatrix} s \\ 1 \end{pmatrix} a^{s-1} + l_{32} a^s & a^s \\ \begin{pmatrix} s \\ 1 \end{pmatrix} a^{s-1} + l_{21} a^s & a^s & 0 \\ a^s & 0 & 0 \end{array} \right).$$

Agora, fazendo a decomposição LU de K_s , isto é, $K_s = L_s U_s$, podemos ver que $L_s \rightarrow I$.

Logo,

$$A_1^s = X P L_s U_s U = X P (I + E_s) U_s U, \text{ onde } E_s \rightarrow 0.$$

Logo, o produto $Q_1 Q_2 \dots Q_s$ das matrizes obtidas pelo algoritmo QR converge essencialmente para a matriz obtida da decomposição QR de XP . Fazendo $XP = QR$, temos

$$A_s \rightarrow Q^t A_1 Q = Q^t X J X^{-1} Q = R P^t J P R^{-1},$$

onde

$$P^t J P = \begin{pmatrix} a & 1 & 0 \\ 0 & a & 1 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}.$$

Portanto, A_s converge para uma matriz triangular superior.

Este resultado pode ser estendido para matrizes com divisores elementares de qualquer ordem. A taxa de convergência é controlada por $\frac{a}{s} \rightarrow 0$. Quanto menor o valor de a , mais rápida a convergência.

4.1.8 Matrizes simétricas

Além das matrizes na forma de Hessenberg, as matrizes simétricas também possuem um papel importante nos algoritmos LR e QR. Podemos ver que o algoritmo QR mantém a simetria das matrizes A_s , pois $A_{s+1} = Q_s^t A_s Q_s$. Já o algoritmo LR, em geral, não mantém a simetria.

Se A_1 é uma matriz definida-positiva, podemos fazer a seguinte modificação no algoritmo LR: ao invés de calcularmos a decomposição LU de A_s , calculamos sua decomposição de Cholesky, ou seja,

$$\begin{aligned}\tilde{A}_1 &= A \\ \tilde{A}_s &= L_s L_s^t, \quad \tilde{A}_{s+1} = L_s^t L_s, \quad s = 1, 2, \dots\end{aligned}$$

Podemos ver que as matrizes A_s são simétricas e positivas definidas. Assim, o processo se mantém e podemos demonstrar que

$$\tilde{A}_s = L_{s-1}^{-1} \dots L_2^{-1} L_1^{-1} A_1 L_1 L_2 \dots L_{s-1} = L_{s-1}^t \dots L_2^t L_1^t A_1 (L_1^{-1})^t (L_2^{-1})^t \dots (L_{s-1}^{-1})^t \quad (4.7)$$

e

$$(L_1 L_2 \dots L_s)(L_s \dots L_2 L_1)^t = A_1^s. \quad (4.8)$$

Dessa forma, o volume computacional é menor e a estabilidade numérica é melhor. Se A_1 não é definida-positiva, a decomposição de Cholesky irá produzir números complexos na matriz A_2 e já não temos garantia de sua estabilidade numérica. Nesse caso, a matriz A_2 não será hermitiana, mas possuirá os mesmos autovalores de A_1 . Por exemplo, se

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{então} \quad \tilde{A}_2 = \begin{pmatrix} 2 & i \\ i & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

4.1.9 Relação entre os algoritmos QR e LR

Os algoritmos QR e LR-Cholesky estão bem relacionados entre si. De fato, temos que

$$(Q_1 Q_2 \dots Q_s)(R_s \dots R_2 R_1) = A_1^s$$

e, assim,

$$\begin{aligned}(R_s \dots R_2 R_1)^t (Q_1 Q_2 \dots Q_s)^t (Q_1 Q_2 \dots Q_s) (R_s \dots R_2 R_1) &= (R_s \dots R_2 R_1)^t (R_s \dots R_2 R_1) \\ &= (A_1^s)^t A_1^s = A_1^{2s}.\end{aligned}$$

De (4.8), temos que $(L_1 L_2 \dots L_{2s})(L_{2s} \dots L_2 L_1)^t = A_1^{2s}$. Obtemos, então, duas decomposições de Cholesky para A_1^{2s} . Logo,

$$(L_1 L_2 \dots L_{2s}) = (R_s \dots R_2 R_1)^t.$$

Agora, utilizando (4.7), temos que

$$\tilde{A}_{2s+1} = (L_1 L_2 \dots L_{2s})^t A_1 [(L_1 L_2 \dots L_{2s})^t]^{-1}$$

e, utilizando a definição do algoritmo QR, obtemos

$$\begin{aligned} A_{s+1} &= (R_s \dots R_2 R_1) A_1 (R_s \dots R_2 R_1)^{-1} \\ &= (L_1 L_2 \dots L_{2s})^t A_1 [(L_1 L_2 \dots L_{2s})^t]^{-1} = \tilde{A}_{2s+1}. \end{aligned}$$

Este resultado só é válido para matrizes simétricas, seja ela definida-positiva ou não, desde que seja não-singular. Agora, através do algoritmo QR, sempre temos iterações reais se A_1 é uma matriz real. Logo, do algoritmo LR-Cholesky, as matrizes $\tilde{A}_{s+1}$ devem ser reais mesmo que $\tilde{A}_s$ seja complexa. Assim, considerando a matriz $\tilde{A}_2$ em (4.9), obtemos

$$\tilde{A}_3 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

O resultado mais importante para o algoritmo QR é o fato de que a norma euclidiana é preservada, ou seja, os elementos de A_s são limitados por $\|\tilde{A}\|_2$. Quanto ao algoritmo LR-Cholesky, este resultado não é válido quando A_1 não é definida-positiva. Podemos ter $\tilde{A}_2$ com elementos maiores que $\|\tilde{A}\|_2$ e, ao calcularmos $\tilde{A}_3$, esses elementos voltam a ser limitados.

4.1.10 Convergência do algoritmo LR-Cholesky

Vimos que, para matrizes definidas-positivas o algoritmo QR sempre converge e, utilizando a relação entre os algoritmos QR e LR-Cholesky, temos que, quando A_1 é uma matriz definida-positiva, $\tilde{A}_s$ converge para uma matriz diagonal, independente da natureza dos autovalores. A demonstração a seguir não depende dessa relação.

Sejam $A_{(rs)}$ e $L_{(rs)}$ menores principais de ordem r de $\tilde{A}_s$ e L_s , respectivamente. Utilizando a relação $\tilde{A}_s = L_s L_s^t$, obtemos que $A_{(rs)} = [L_{(rs)}]^2$. Por outro lado, como $\tilde{A}_{s+1} = L_s^t L_s$, pelo Teorema das Matrizes Correspondentes, temos que $A_{(r,s+1)}$ é igual à soma do produto dos correspondentes menores principais de ordem r , formado pelas primeiras r linhas de L_s^t e primeiras

r colunas de L_s . Agora, os correspondentes menores principais são iguais pois as correspondentes matrizes são uma a transposta da outra e, assim, $A_{(r,s+1)}$ é a soma dos quadrados. Logo, $A_{(r,s+1)} \geq A_{(r,s)}$.

Todos os menores principais de $\tilde{A}_s$ aumentam a cada iteração e, como são limitados, obviamente tendem a um limite. Logo, todos os elementos que não estão na diagonal principal tendem a zero. Se os autovalores são distintos e a matriz limite possui os autovalores em ordem decrescente, então os $\tilde{a}_{ij}^{(s)}$ tendem a zero com $\left(\frac{\lambda_j}{\lambda_i}\right)$ para $j > i$, e com $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)$ para $j < i$.

Vejamos uma comparação entre os algoritmos LR e LR-Cholesky. Seja A_1 uma matriz simétrica não-singular. Se $A_1 = \tilde{L}_1 \tilde{L}_1^t$ e $A_1 = L_1 R_1$, então

$$L_1 = \tilde{L}_1 D_1 \quad \text{e} \quad R_1 = D_1^{-1} \tilde{L}_1^t,$$

onde D_1 é uma matriz diagonal. Considerando $\tilde{A}_2 = \tilde{L}_1^t \tilde{L}_1$, temos que

$$A_2 = R_1 L_1 = D_1^{-1} \tilde{L}_1^t \tilde{L}_1 D_1 = D_1^{-1} \tilde{A}_2 D_1.$$

De maneira análoga,

$$\tilde{A}_2 = \tilde{L}_2 \tilde{L}_2^t \quad \text{e} \quad A_2 = L_2 R_2 = D_1^{-1} \tilde{L}_2 \tilde{L}_2^t D_1,$$

que, combinada com a unicidade da decomposição triangular, fornece

$$L_2 = D_1^{-1} \tilde{L}_2 D_2, \quad R_2 = D_2^{-1} \tilde{L}_2^t D_1$$

onde D_2 é uma matriz diagonal. Então,

$$\tilde{A}_3 = \tilde{L}_2^t \tilde{L}_2 \quad \text{e} \quad A_3 = R_2 L_2 = D_2^{-1} \tilde{L}_2^t D_1 D_1^{-1} \tilde{L}_2 D_2 = D_2^{-1} \tilde{A}_3 D_2.$$

Podemos ver que, em cada estágio, A_s é obtida de $\tilde{A}_s$ através de uma transformação de similaridade com matrizes diagonais, ou seja, $A_s = D_{s-1}^{-1} \tilde{A}_s D_{s-1}$. Observe que o fato de A_1 ser ou não definida-positiva não influencia no resultado. Porém, nesse caso, as matrizes D_{s-1} serão complexas para os valores pares de s e, assim, podemos obter uma matriz A_s que não possui decomposição triangular.

Se A_1 é uma matriz definida-positiva, então $\tilde{A}_s$ converge para uma matriz diagonal, enquanto que A_s converge para uma matriz triangular superior. Os elementos de D_s são da ordem de $(\lambda_i)^{-\frac{1}{2}s}$.

Podemos utilizar *shifts* na origem no algoritmo LR-Cholesky, mas, para garantir que todos os elementos permaneçam reais e que o processo seja estável, devemos escolher k_s de modo que

$(A_s - k_s I)$ seja definida-positiva em cada iteração. Por outro lado, para obtermos convergência mais rápida devemos escolher k_s próximo de λ_n , o menor autovalor. Podemos ver que a escolha dos k_s é um problema mais delicado do que para as matrizes de Hessenberg. Com relação ao algoritmo QR, não existe dificuldade, pois o fato da matriz ser ou não definida-positiva não influencia no resultado.

4.2 Método assemelhado ao de Francis

Seja A uma matriz não-singular de ordem n . A partir de A construímos uma sequência de matrizes A_k , $k = 1, 2, \dots$, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} A_1 &= A \\ (A_k^t A_k | A_k^t) &= R_k^t (R_k | Q_k^t), \quad k = 1, 2, \dots, \\ A_{k+1} &= R_k Q_k \end{aligned}$$

onde utilizamos a decomposição de Cholesky, como vimos na seção 2.9, na matriz aumentada com n linhas e $2n$ colunas, $(A_k^t A_k | A_k^t)$. Esse método foi denominado "Método Assemelhado ao de Francis" (MAF) e foi apresentado por Andrade e Bracciali em [1]

A possibilidade de aplicação da decomposição de Cholesky à matriz $(A_k^t A_k | A_k^t)$ é possível, pois A_k sendo não-singular, a matriz $(A_k^t A_k)$ é simétrica definida-positiva e, portanto, decomponível no produto $R_k^t R_k$.

Vamos mostrar, agora, que o procedimento acima equivale a decompor a matriz A_k no produto $Q_k R_k$, onde Q_k é uma matriz ortogonal e R_k triangular superior. Vejamos os seguintes teoremas.

Teorema 4.1. *A matriz Q_k obtida da aplicação do algoritmo de Cholesky a $(A_k^t A_k | A_k^t)$ é ortogonal.*

Demonstração: Aplicar o método de Cholesky à matriz aumentada $(A_k^t A_k | A_k^t)$ para obter a matriz $(R_k | Q_k^t)$ é o mesmo que pré-multiplicá-la por $(R_k^t)^{-1}$.

Como

$$(R_k^t)^{-1} (A_k^t A_k | A_k^t) = ((R_k^t)^{-1} A_k^t A_k | (R_k^t)^{-1} A_k^t),$$

então

$$(R_k^t)^{-1} A_k^t A_k = R_k \quad \text{e} \quad (R_k^t)^{-1} A_k^t = Q_k^t.$$

Das duas equações acima, obtemos

$$Q_k^t A_k = R_k \quad (4.10)$$

e, assim, $Q_k^t = R_k A_k^{-1}$.

Logo, da equação anterior,

$$\begin{aligned} Q_k^t Q_k &= R_k A_k^{-1} (R_k A_k^{-1})^t = R_k A_k^{-1} (A_k^{-1})^t R_k^t \\ &= R_k (A_k^t A_k)^{-1} R_k^t = R_k (R_k^t R_k)^{-1} R_k^t \\ &= R_k R_k^{-1} (R_k^t)^{-1} R_k^t = I. \end{aligned}$$

Portanto, $Q_k^t = Q_k^{-1}$, ou seja, Q_k é ortogonal. ■

Teorema 4.2. *As matrizes R_k e Q_k , obtidas através do MAF, são tais que $A_k = Q_k R_k$.*

Demonstração: Como Q_k é uma matriz ortogonal, $Q_k^t = Q_k^{-1}$. Portanto, de (4.10),

$$A_k = Q_k R_k. \quad \blacksquare$$

O Teorema 2.16 garante que a decomposição de uma matriz não singular A no produto $A = QR$, onde Q é ortogonal e R é triangular superior, é única. Portanto, as matrizes Q e R obtidas pelo MAF são as mesmas que aquelas obtidas pelo método QR de Francis. Desta forma, temos garantida a convergência do MAF através da convergência do Algoritmo QR de Francis.

Assim, como no algoritmo LR, o MAF pode parecer inferior ao algoritmo QR por não se aplicar a todas as matrizes, apenas às matrizes não-singulares. Porém, se A é uma matriz singular, de acordo com o Teorema de Gerschgorin (Teorema 2.12), podemos calcular o intervalo onde estão todos os seus autovalores e fazer um *shift*, $B = (A - kI)$, obtendo, assim, uma matriz não-singular. Ao obtermos os autovalores da matriz B , $\lambda'_1, \dots, \lambda'_n$, basta removermos o *shift* dos autovalores, ou seja, os autovalores de A são $\lambda_1 = \lambda'_1 + k, \dots, \lambda_n = \lambda'_n + k$.

Quanto à convergência, o MAF produz as mesmas matrizes Q_k e R_k do algoritmo QR de Francis (como podemos ver na subseção 5.1.2). Dessa forma, sua convergência é garantida pela convergência do algoritmo QR.

Capítulo 5

Comparação dos métodos e conclusões

Neste capítulo, fazemos uma análise comparativa entre os métodos estudados. O estudo da eficiência do novo método, o MAF, em comparação com os algoritmos QR de Francis e LR de Rutishauser, foi feito programando-se os métodos envolvidos e efetuando-se exaustiva análise comparativa dos mesmos.

5.1 Análise comparativa

Com o objetivo de obter resultados comparativos entre o MAF e os conhecidos algoritmos LR e QR quanto ao tempo de processamento, programamos os três métodos envolvidos utilizando o MAPLE 9, com os mesmos testes de parada e a mesma precisão. Esses programas foram executados em um computador Pentium 4 com 3 GHz de processador e 1 GB de memória RAM.

Testamos os programas com matrizes de ordem $n = 5, 10, 15, 20$. Para cada valor de n , utilizamos matrizes com autovalores diferentes, matrizes com autovalores iguais e matrizes simétricas.

Em seguida, calculamos os autovalores de cada matriz através dos métodos LR, QR-G (método QR utilizando as rotações de Givens), QR-H (método QR utilizando as reflexões de Householder) e MAF, por três vezes. Na primeira vez, a matriz estava em sua forma original; na segunda, a matriz era reduzida primeiramente à forma de Hessenberg e, por último, além de reduzirmos a matriz à forma de Hessenberg, também utilizamos o processo de deflação.

Os resultados são apresentados nos gráficos a seguir.

5.1.1 Gráficos comparativos

(i) Matrizes com Autovalores Diferentes



Legenda dos Gráficos

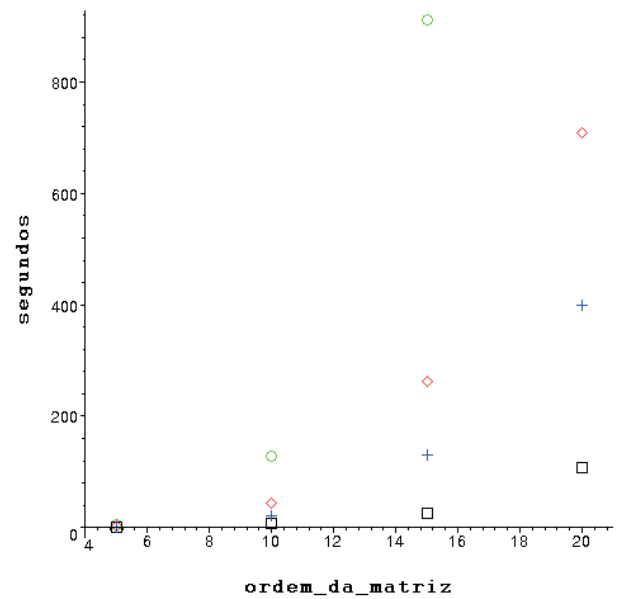


Figura 5.1: Matrizes na forma original.

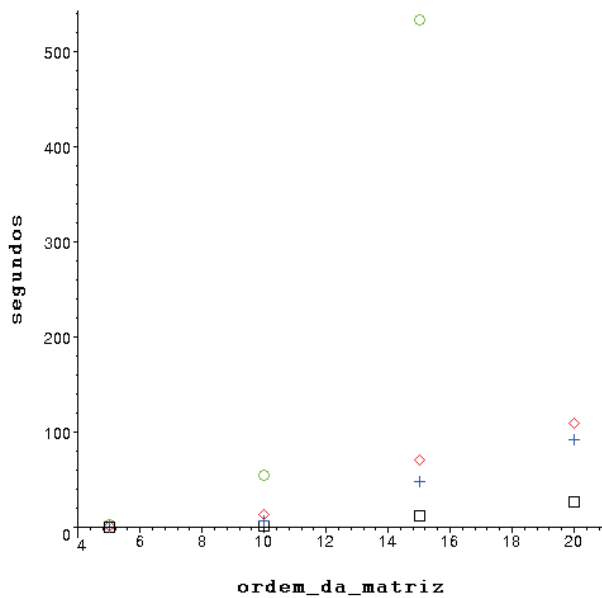


Figura 5.2: Matrizes na forma Hessenberg.

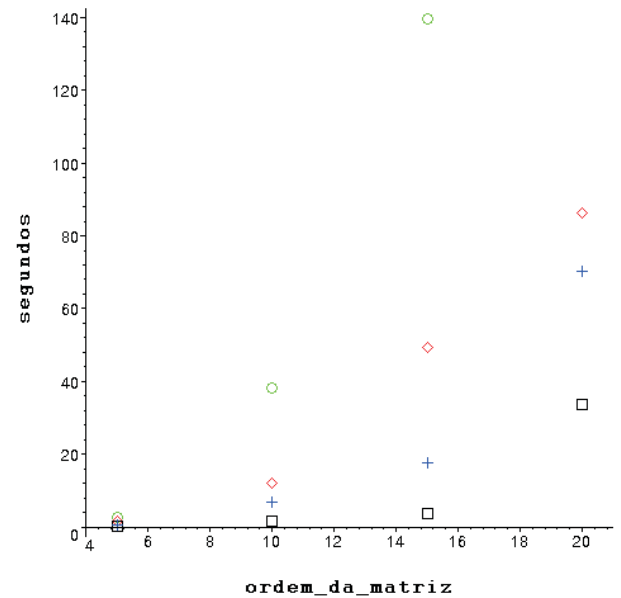


Figura 5.3: Matrizes reduzidas à forma de Hessenberg e Deflação.

(ii) Matrizes com Autovalores Iguais

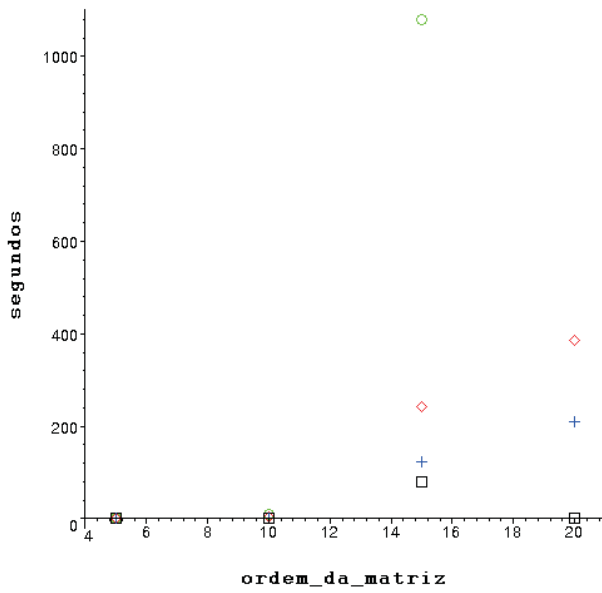


Figura 5.4: Matrizes na forma original.

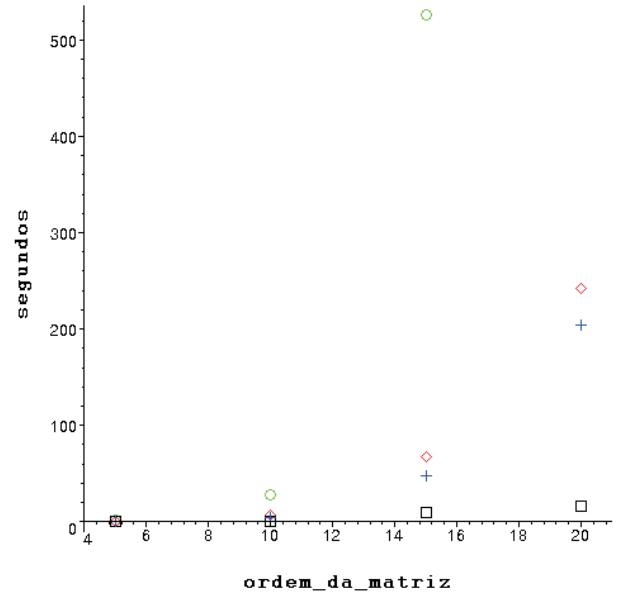


Figura 5.5: Matrizes na forma Hessenberg.

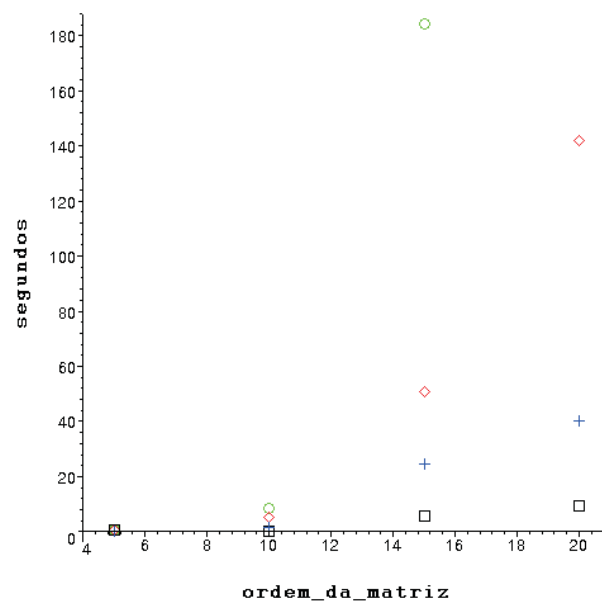


Figura 5.6: Matrizes reduzidas à forma de Hessenberg e Deflação.

(iii) Matrizes Simétricas

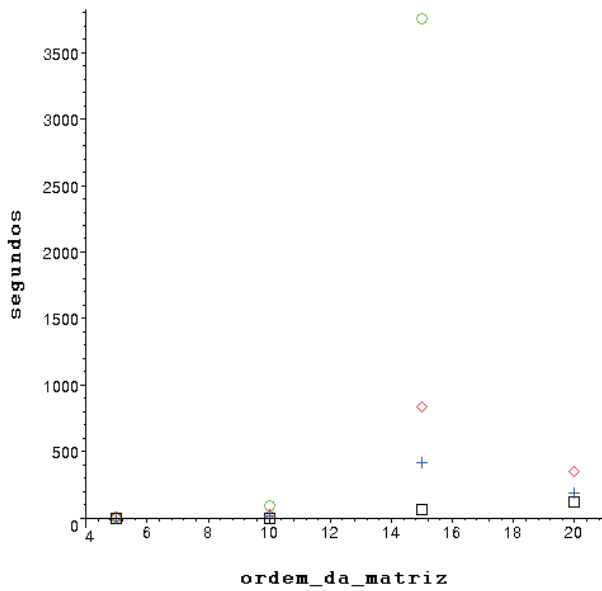


Figura 5.7: Matrizes na forma original.

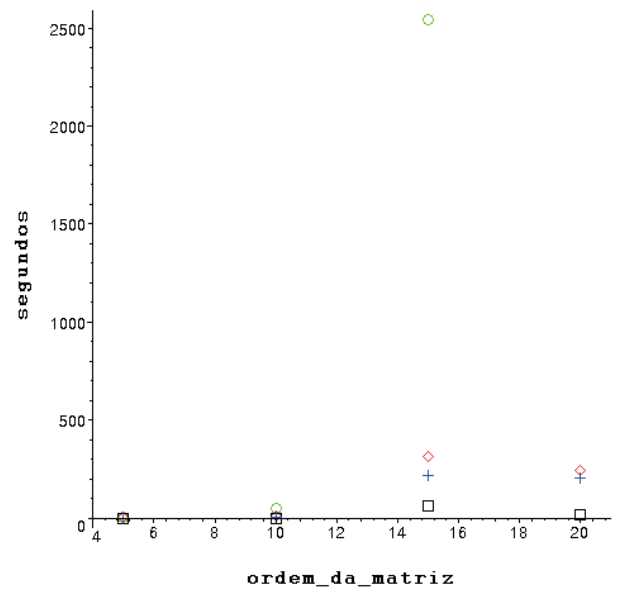


Figura 5.8: Matrizes na forma Hessenberg.

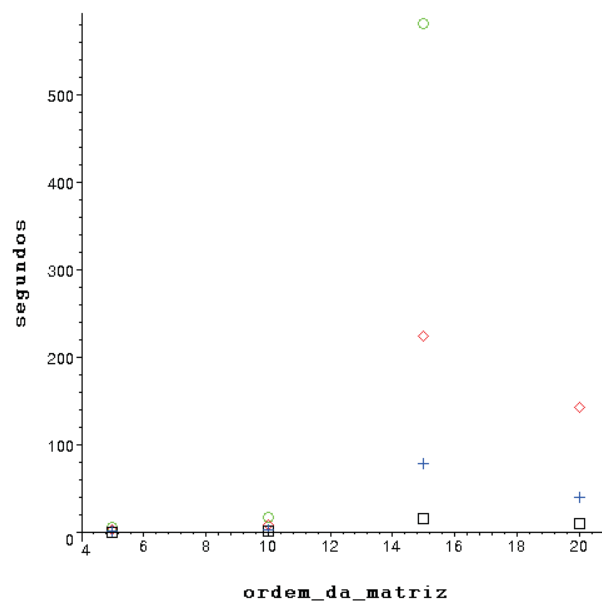


Figura 5.9: Matrizes reduzidas à forma de Hessenberg e Deflação.

5.1.2 Tabelas comparativas

Apresentaremos, agora, nas Tabelas 5.1, 5.2 e 5.3 abaixo, o tempo médio de processamento (em segundos) para os métodos estudados: MAF, QR (com Givens), LR e QR (com Householder). Para estas tabelas foram utilizadas matrizes de ordem 10, com precisão de 10^{-20} , sendo que, na primeira tabela, utilizamos matrizes com autovalores diferentes, para a segunda, matrizes com autovalores iguais e, para a terceira, utilizamos matrizes simétricas.

Tabela 5.1: Matrizes com autovalores diferentes

Processos utilizados	Tempo Médio (segundos)			
	MAF	QR-G	LR	QR-H
Simples	19.96	43.62	8.53	128.42
Hessenberg	7.48	13.67	1.98	54.95
Hessenberg/Deflação	6.85	12.06	1.71	38.33

Tabela 5.2: Matrizes com autovalores iguais

Processos utilizados	Tempo Médio (segundos)			
	MAF	QR-G	LR	QR-H
Simples	6.4	14.32	4.00	40.12
Hessenberg	3.74	7.00	0.88	28.48
Hessenberg/Deflação	1.34	5.18	0.30	8.52

Tabela 5.3: Matrizes com autovalores iguais

Processos utilizados	Tempo Médio (segundos)			
	MAF	QR-G	LR	QR-H
Simples	14.6	30.86	2.49	97.12
Hessenberg	6.5	11.75	1.55	49.04
Hessenberg/Deflação	2.63	8.73	1.00	17.17

A seguir, apresentamos uma das matrizes, de ordem 10, utilizada para comparação entre os três métodos e uma tabela comparando os autovalores obtidos pelos métodos com os valores exatos dos autovalores da matriz abaixo.

$$A = \begin{pmatrix} \frac{53}{9} & \frac{26}{9} & \frac{44}{9} & \frac{17}{9} & \frac{8}{9} & -\frac{1}{9} & -\frac{10}{9} & -\frac{28}{9} & -\frac{19}{9} & -\frac{37}{9} \\ \frac{34}{9} & \frac{52}{9} & \frac{43}{9} & \frac{16}{9} & \frac{7}{9} & -\frac{2}{9} & -\frac{11}{9} & -\frac{29}{9} & -\frac{20}{9} & -\frac{38}{9} \\ 4 & 3 & 6 & 2 & 1 & 0 & -1 & -3 & -2 & -4 \\ \frac{11}{3} & \frac{8}{3} & \frac{14}{3} & \frac{17}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{4}{3} & -\frac{10}{3} & -\frac{7}{3} & -\frac{13}{3} \\ \frac{32}{9} & \frac{23}{9} & \frac{41}{9} & \frac{14}{9} & \frac{50}{9} & -\frac{4}{9} & -\frac{13}{9} & -\frac{31}{9} & -\frac{22}{9} & -\frac{40}{9} \\ \frac{31}{9} & \frac{22}{9} & \frac{40}{9} & \frac{13}{9} & \frac{4}{9} & \frac{49}{9} & -\frac{14}{9} & -\frac{32}{9} & -\frac{23}{9} & -\frac{41}{9} \\ \frac{10}{3} & \frac{7}{3} & \frac{13}{3} & \frac{4}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{16}{3} & -\frac{11}{3} & -\frac{8}{3} & -\frac{14}{3} \\ \frac{28}{9} & \frac{19}{9} & \frac{37}{9} & \frac{10}{9} & \frac{1}{9} & -\frac{8}{9} & -\frac{17}{9} & -\frac{46}{9} & -\frac{26}{9} & -\frac{44}{9} \\ \frac{29}{9} & \frac{20}{9} & \frac{38}{9} & \frac{11}{9} & \frac{2}{9} & -\frac{7}{9} & -\frac{16}{9} & -\frac{34}{9} & -\frac{47}{9} & -\frac{43}{9} \\ 3 & 2 & 4 & 1 & 0 & -1 & -2 & -4 & -3 & 5 \end{pmatrix}.$$

Na tabela abaixo estão os autovalores exatos e os valores obtidos pelos métodos estudados. As colunas *MAF*, *QR-G*, *LR* e *QR-H* representam os elementos da diagonal principal das matrizes obtidas através dos métodos MAF, QR de Francis (com Givens), LR de Rustishauser e QR de Francis (com Householder) respectivamente.

Tabela 5.4: Autovalores de A

Valores exatos	MAF	QR-F	LR	QR-H
1	1.000000000	1.000000000	1.000000000	1.000000000
2	2.000000000	2.000000000	2.000000000	2.000000000
3	3.000000000	3.000000000	3.000000000	3.000000000
4	4.000000000	4.000000000	4.000000000	4.000000000
5	5.000000000	5.000000000	5.000000000	5.000000000
6	6.000000000	6.000000000	6.000000000	6.000000000
7	7.000000000	7.000000000	7.000000000	7.000000000
8	8.000000000	8.000000000	8.000000000	8.000000000
9	9.000000000	9.000000000	9.0000020390	9.000000000
10	10.000000000	10.000000000	9.999979690	10.000000000

5.2 Conclusões

Como era de se esperar, o método LR revelou-se o mais rápido. Porém há que se considerar que as matrizes foram escolhidas de modo a todas as matrizes A_k serem decomponíveis em LU, para que fosse possível a aplicação do método LR. Sabe-se que o método LR não é aplicável a uma matriz qualquer, restringindo-se, assim, a sua aplicabilidade a uma classe particular de matrizes, o que dá maior interesse ao método QR de Francis, já existente, e ao MAF, aqui proposto, para os quais não existe tal restrição.

Conseguimos demonstrar que o MAF, para a determinação numérica de autovalores de matrizes de ordem n , converge no caso em que seus autovalores são distintos em módulo. Se os autovalores de A são todos iguais, verificamos experimentalmente que a convergência sempre ocorre, embora muito lentamente.

Os gráficos apresentados na seção anterior mostram que o MAF apresenta tempos menores quando comparado ao QR. Isto, aliado ao fato de que a obtenção da matriz unitária Q_k , em cada estágio k , é mais simplesmente obtida pelo MAF, evidencia sua maior eficiência. Além disso, verificamos que:

- (i) a redução prévia da matriz A à forma de Hessenberg acelera o processo de convergência em todos os métodos estudados;
- (ii) ao associarmos redução prévia da matriz A à forma de Hessenberg ao processo de deflação, obtemos convergência ainda mais rápida em todos os métodos estudados;
- (iii) o MAF converge sempre mais rapidamente do que o QR de Francis em todos os casos, embora mais lentamente que o LR de Rutishauser

Resta ainda ressaltar que, no conjunto das matrizes testadas, procurou-se evitar as que poderiam trazer problemas de estabilidade ao MAF, em virtude do produto $B = A^t A$. No caso em que a matriz A é mal condicionada, poderá ocorrer instabilidade no processo iterativo devido à ocorrência do produto $A^t A$, o que faz crescer o número de condição.

Referências Bibliográficas

- [1] Andrade, E.X.L. de e Bracciali C.F., *Um método, assemelhado ao de Francis, para determinação de autovalores de matrizes*, Notas do ICMSC-USP, São Carlos, 1990.
- [2] Bai, Z., Demmel, J. e Gu, M., An inverse free parallel spectra divide e conquer algorithm for nonsymmetric eigenproblems, *Numer. Math*, **76** (1997), 279-308.
- [3] Benner, P. e Faßbender, H., Two connections between the SR and HR eigenvalue algorithms, *Linear Algebra and Its Applications*, **272** (1998), 17-32.
- [4] Brebner, M.A. e Grad, J., Eigenvalues of $Ax = \lambda Bx$ for real symmetric matrices A and B computed by reduction to pseudosymmetric form and the HR process, *Linear Algebra and Its Applications*, **118** (1982), 43-99.
- [5] Cooper, S.C. e Gustafson, P.E., The strong Chebyshev distribution and orthogonal Laurent polynomials, *J. Approx. Theory*, **92** (1998), 361-378.
- [6] Della-Dora, J., Numerical linear algorithms and group theory, *Linear Algebra and Its Applications*, **10** (1975), 267-283.
- [7] Fike, C.T., Note on the practical computation of proper values, *J. Assoc. Comput. Mach.*, **6** (1959), 360-362.
- [8] Francis, J.G.F. e Strachey, C., The reduction of a matrix to codiagonal form by eliminations, *Computer J.* **4** (1961), 168-176.
- [9] Francis, J.G.F., The QR transformation-Part1, *Computer J.*, **4** (1961), 265-271.
- [10] Francis, J.G.F., The QR transformation-Part2, *Computer J.*, **4** (1961), 332-345.
- [11] Gantmacher, F.R., *Matrix theory*, Chelsea Publishing Company, New York, Vol. 1 1959.

- [12] Golub, G.H. e Loan, C.F.V., *Matrix computations*, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1983.
- [13] Haag, J. B. e Watkins D.S., QR-like algorithms for the nonsymmetric eigenvalue problems, *ACM Trans. on Math. Software*, **19** (1993), 407-418.
- [14] Hager, W.W., *Applied numerical linear algebra*, Pentice-Hall International Editions, 1988.
- [15] Kaufman, L., A parallel QR algorithm for the symmetric tridiagonal eigenvalue problem, *Journal of Parallel and Distributed Computing*, **23** (1994), 429-434.
- [16] Kobayashi, L.N., Sobre método iterativo assemelhado ao de Rutishauser e de Francis, para a solução numérica do problema de autovalores de matrizes, *Tese de Mestrado apresentada ao ICMSC-USP*, 1979.
- [17] Latini M., The QR algorithm, [http : //www.its.caltech.edu/ ~siam/student _ seminar/03-04 _ season.html](http://www.its.caltech.edu/~siam/student_seminar/03-04_season.html) 2004.
- [18] Lazarini, C. e Franco N.M.B., *Tópicos de cálculo numérico*, Notas de Aula, São Carlos, 1991.
- [19] Lipschutz, S., *Álgebra Linear*, Makron Books, 1965.
- [20] Matioli J.C., Yuan J., Biloti R., The QR algorithm, *submetido*, 2004.
- [21] Muir, T., *A treatise on the teory of determinants*, Dover Publications, inc., Edição revisada por William H. Metzler, 1928.
- [22] Noble, B., Daniel, J.W., *Applied linear algebra*, Prentice-Hall, 3^a Edição, 1988.
- [23] Peter, L., Tismenetsky, M., *The theory of matrices*, Academic Press, San Diego, 1985.
- [24] Rutishauser, H., Solution of eigenvalue problems with the LR-Transformation, *Nat. Bur. Steards Appl. Math. Ser.*, **49** (1958), 47.
- [25] Rutishauser, H., Schwarz, H. R. e Stiefel, E., *Numerical analysis of symmetric matrices*, Prentice-Hall Inc., New Jersey, 1973.
- [26] Watkins, D.S., The transmission of shifts and shift blurring in the QR algorithm, *Linear Algebra and Its Applications*, **241-243** (1996), 877-896.

- [27] Watkins, D.S., QR-like algorithms for eigenvalue problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **123** (1999), 67-83.
- [28] Wilkinson, J.H., Householder's method for the solution of the algebraic eigenproblem, *The Computer Journal*, **3** (1960), 23-27.
- [29] Wilkinson, J.H., stability of the reduction of a matrix to almost triangular and triangular forms by elementary similarity transformations, *J. Assoc. Comput. Mach.*, **6** (1960), 336-358.
- [30] Wilkinson, J.H., *The algebraic eigenvalue problem*, Clarendon Press, Oxford, 1965.