Matrici elementari e fattorizzazioni

Dario A. Bini, Università di Pisa

18 agosto 2019

Sommario

Questo modulo didattico introduce ed analizza la classe delle matrici elementari. Tale classe verrà usata per costruire algoritmi di fattorizzazione di matrici e risolvere sistemi lineari.

1 Introduzione

Si introduce la classe delle matrici elementari che hanno proprietà computazionali interessanti e permettono di costruire algoritmi efficienti per calcolare le principali fattorizzazioni di matrici. Poi si considerano due sottoclassi particolari di matrici elementari: le matrici elementari di Gauss che sono triangolari inferiori, le matrici elementari di Householder che sono unitarie e hermitiane. Successivamente mostriamo come le matrici elementari possono essere usate per calcolare una generica fattorizzazione del tipo $A = SU$ dove S è un prodotto di matrici elementari e U è triangolare superiore. La specializzazione nella scelta delle matrici elementari alle matrici di Gauss e di Householder conduce ai metodi di Gauss e di Householder per la fattorizzazione LU e QR di una matrice.

2 Matrici elementari

Siano $u, v \in \mathbb{C}^n$. Per ragioni di chiarezza osserviamo che, con le nostre notazioni, l'espressione $v^H u = \sum_{i=1}^n \bar{v}_i u_i$ fornisce un numero complesso; mentre l'espressione uv^H, prodotto righe per colonne di un vettore colonna e di un vettore riga, fornisce una matrice $n \times n$ di elementi $u_i \bar{v}_j$. Ciò premesso, siamo pronti per dare la definizione di matrice elementare

Definizione 1 Una matrice del tipo

$$M = I - \sigma uv^H,$$

dove I è la matrice identica $n \times n$, σ un numero complesso e $u, v \in \mathbb{C}^n$, è detta *matrice elementare*.

Si osservi che nella definizione data c'è ridondanza di parametri, infatti il parametro scalare σ potrebbe essere inglobato in uno dei due vettori, inoltre uno dei due vettori potrebbe essere normalizzato a piacimento. Questa ridondanza ci permette una maggior facilità nell'analizzare le proprietà computazionali di questa classe di matrici.

Si osservi ancora che se $x \in \mathbb{C}^n$ allora $Mx = x - \sigma u(v^H x)$, per cui tutti i vettori dello spazio ortogonale a v, cioè tali che $v^H x = 0$, vengono trasformati da M in se stessi. Se d'altro canto $x = u$ allora $Mu = (1 - \sigma v^H u)u$, cioè $1 - \sigma v^H u$ è autovalore di M corrispondente all'autovettore u. In particolare se $\sigma v^H u = 1$ allora M è singolare. Viceversa, se M è singolare, esiste $x \neq 0$ tale che $Mx = 0$, cioè deve essere $x = \sigma(v^H x)u$, $v^H x \neq 0$. Per cui a meno di una costante moltiplicativa vale $x = u$, e $\sigma v^H u = 1$.

Studiamo ora alcune proprietà computazionali della classe di matrici elementari. Per semplicità assumiamo che $\sigma uv^H \neq 0$. Questa condizione esclude il caso in cui $M = I$ che non ha bisogno di ulteriore analisi.

Poiché M lascia l'intero sottospazio ortogonale a v invariato, e ha u come autovettore, così fa l'inversa di M se $\det M \neq 0$. Quindi viene naturale cercare l'inversa di M nella classe delle matrici elementari dello stesso tipo di M. Proviamo allora a cercare un numero complesso τ tale che $M^{-1} = (I - \tau uv^H)$. Cioè imponiamo la condizione $(I - \tau uv^H)M = I$, dove naturalmente supponiamo che $\sigma v^H u \neq 1$, condizione necessaria e sufficiente di invertibilità. Sviluppando i calcoli si ottiene

$$(\tau\sigma(v^H u) - \tau - \sigma)uv^H = 0$$

che è verificata se e solo se

$$\tau(1 - \sigma v^H u) = -\sigma.$$

Se $\sigma v^H u = 1$ abbiamo già osservato che la matrice non è invertibile, infatti l'equazione di sopra non ha soluzione. Se $\sigma v^H u \neq 1$ allora l'equazione ha soluzione

$$\tau = \frac{-\sigma}{1 - \sigma v^H u}.$$

Si può sintetizzare questo risultato col seguente

Teorema 1 *La matrice $M = I - \sigma uv^H$ è non singolare se e solo se $\sigma v^H u \neq 1$ e la sua inversa è data da*

$$I - \tau uv^H, \qquad \tau = \frac{-\sigma}{1 - \sigma v^H u}.$$

Il calcolo di τ richiede l'esecuzione di n moltiplicazioni, n addizioni e una divisione. Un'altra proprietà interessante è riportata nel seguente

Teorema 2 *Data $M = I - \sigma uv^H$ matrice elementare e dato un vettore b, il calcolo del prodotto $y = Mb$ costa $2n + 1$ moltiplicazioni e $2n$ addizioni. La risoluzione del sistema $Mx = b$ costa $3n + 1$ moltiplicazioni $3n$ addizioni e una divisione.*

Una proprietà importante delle matrici elementari è che sono in grado di trasformare un qualsiasi vettore non nullo in un qualsiasi altro vettore non nullo come è precisato nel seguente

Teorema 3 *Per ogni $x, y \in \mathbb{C}^n \backslash 0$ esiste una matrice elementare $M = I - \sigma u v^H$ non singolare tale che $Mx = y$.*

Dim. Si procede in modo costruttivo. La condizione $(I - \sigma u v^H)x = y$ si riscrive come $\sigma u(v^H x) = x - y$. Basta quindi scegliere v non ortogonale a x e porre $\sigma u = (x - y)/(v^H x)$. Per avere la non singolarità di M basta imporre la condizione $\sigma v^H u \neq 1$, cioè $v^H(x - y)/(v^H x) \neq 1$, che è equivalente a $v^H y \neq 0$. Basta allora scegliere v in modo che non sia ortogonale né a x né a y. $\square$

3 Matrici elementari di Gauss

Una matrice elementare di Gauss è ottenuta ponendo $v = e^{(1)}$, primo versore della base canonica, $\sigma = 1$ e u tale che $u_1 = 0$. Cioè per una matrice elementare di Gauss M vale

$$M = I - uv^H = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ -u_2 & 1 & & \\ \vdots & 0 & \ddots & \\ -u_n & & & 1 \end{bmatrix}$$

È facile verificare che $M^{-1} = I + uv^H$ cioè

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ u_2 & 1 & & \\ \vdots & 0 & \ddots & \\ u_n & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Quindi invertire una matrice elementare di Gauss non richiede alcuna operazione aritmetica. Basta cambiare segno agli elementi della prima colonna escluso l'elemento diagonale.

Si osservi che se $x = (x_i)$ è tale che $x_1 \neq 0$ allora esiste una matrice elementare di Gauss M tale che $Mx = x_1 e^{(1)}$. Infatti basta porre $u_i = x_i/x_1$, cioè

$$M = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ -x_2/x_1 & 1 & & \\ \vdots & 0 & 1 & \\ -x_n/x_1 & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Si osservi che le matrici M e M^{-1} hanno entrambe norma infinito uguale a $1 + \max_i |x_i|/|x_1|$ quindi il numero di condizionamento in norma infinito di M

è $(1+\max_i |x_i|/|x_1|)^2$. Se poi x è tale che $|x_1| = \max_i |x_i|$ allora il numero di condizionamento di M in norma infinito è al più 4. È quindi indipendente dalla dimensione n.

Un'altra classe di matrici elementari con numero di condizionamento indipendente da n è quella delle matrici di Householder.

4 Matrici elementari di Householder

Una matrice elementare di Householder è una matrice elementare hermitiana e unitaria. Vale quindi $M = I - \beta uu^H$ con $\beta = 0$ oppure $\beta = 2/(u^H u)$ e $u \neq 0$. Infatti, risulta

$$(I - \beta uu^H)(I - \beta uu^H)^H = (I - \beta uu^H)^2 = I - 2\beta uu^H + \beta^2 (u^H u) uu^H = I.$$

Evidentemente l'inversa di una matrice di Householder M è M stessa. Inoltre in norma 2 il condizionamento di M è 1 poiché le matrici unitarie hanno norma 2 unitaria.

Non è difficile costruire una matrice di Householder che trasformi un vettore x non nullo in un vettore del tipo $\alpha e^{(1)}$. Infatti, si osserva subito che, essendo M unitaria essa trasforma i vettori lasciando invariata la norma 2, risulta quindi $|\alpha| = \|x\|_2$. Inoltre, poiché M è hermitiana, il valore di $x^H M x$ è reale qualunque sia x. Questo implica che $x^H \alpha e^{(1)} = \bar{x}_1 \alpha$ è reale. Ciò permette di determinare il valore di α. Infatti di α conosciamo il modulo, quindi α è determinato a meno di un fattore complesso di modulo 1. Vale cioè $\alpha = \theta \|x\|_2$, con $|\theta| = 1$. Si verifica facilmente che se poniamo

$$\theta = \begin{cases} \pm x_1/|x_1| & \text{se } x_1 \neq 0, \\ \pm 1 & \text{se } x_1 = 0, \end{cases}$$

nel caso $x_1 \neq 0$ risulta

$$\bar{x}_1 \alpha = \pm \bar{x}_1 x_1 / |x_1| \, \|x\|_2 = \pm |x_1| \, \|x\|_2 \in \mathbb{R},$$

se invece $x_1 = 0$ si ha $\bar{x}_1 \alpha = 0 \in \mathbb{R}$.

In teoria tutte e due i segni vanno bene, ma per ragioni di stabilità numerica vedremo tra poco che la scelta obbligata è il segno meno.

A questo punto siamo pronti per determinare il vettore u e conseguentemente lo scalare $\beta = 2/(u^H u)$. Infatti, dalla condizione $Mx = \alpha e^{(1)}$ si deduce che $(I - \beta uu^H)x = \alpha e^{(1)}$ e quindi

$$\beta (u^H x) u = x - \alpha e^{(1)}.$$

Ciò permette di determinare il vettore u a meno della sua lunghezza. Ma la lunghezza di u non è rilevante poichè questa informazione viene inglobata nel parametro β. Infatti basta porre

$$u = x - \alpha e^{(1)}$$

e ricavare β dalla condizione $\beta = 2/(u^H u)$. Infatti con questa scelta di β si verifica facilmente che $\beta(u^H x) = 1$. Si osserva che il vettore u ha tutte le componenti uguali a quelle di x tranne la prima che, nel caso $x_1 \neq 0$ è

$$u_1 = x_1 - \alpha = x_1 \mp \theta \|x\|_2 = x_1(1 \mp \|x\|_2/|x_1|).$$

È evidente che nella determinazione di θ conviene optare per il segno meno in modo che nella formula precedente non ci sia cancellazione numerica. Chiaramente, nel caso $x_1 = 0$ risulta $u_1 = -\alpha = \mp\|x\|_2$. In questo caso il segno non è influente ai fini della stabilità numerica. Per semplicità scegliamo ancora il segno meno. In questo modo si ha

$$u_1 = \begin{cases} x_1(1 + \frac{1}{|x_1|}\|x\|_2) & \text{se } x_1 \neq 0, \\ \|x\|_2 & \text{se } x_1 = 0, \end{cases}$$

e vale

$$\beta = 1/(\|x\|_2^2 + |x_1|\,\|x\|_2). \tag{1}$$

Il costo computazionale del calcolo di u e di β è dominato dal calcolo di $\|x\|_2$, cioè n moltiplicazioni e $n-1$ addizioni più una estrazione di radice. Si osservi inoltre che da (1) segue che $\beta(u^H x) = 1$ come richiesto.

5 Fattorizzazione mediante matrici elementari

Mostriamo come sia possibile utilizzare le matrici elementari per realizzare metodi per fattorizzare una matrice A nel prodotto $A = SU$ dove

$$S = M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1}$$

è un prodotto di matrici elementari ed U è una matrice triangolare superiore. La disponibilità di tale fattorizzazione ci permette di risolvere agevolmente il sistema $Ax = b$ attraverso la risoluzione dei due sistemi $Sy = b$ e $Ux = y$. Il secondo, essendo con matrice triangolare superiore, si risolve con n^2 operazioni aritmetiche. Il primo permette di esprimere la soluzione mediante la formula

$$y = M_{n-1} \cdots M_1 b$$

e quindi, se le matrici elementari $M_1, \ldots, M_{n-1}$ sono disponibili, permette di calcolare la soluzione in circa $3n^2$ moltiplicazioni e altrettante addizioni grazie al teorema 2. Cioè, data la fattorizzazione di A, il sistema $Ax = b$ è risolubile in $O(n^2)$ operazioni aritmetiche. Quindi tutto è ricondotto al calcolo della fattorizzazione $A = SU$. Vediamo ora come si realizza.

Posto $A_1 = A$ andiamo a generare una successione di matrici $A_k = (a_{i,j}^{(k)})$, $k = 1, 2 \ldots, n$ tali che $A_{k+1} = M_k A_k$ dove M_k è una matrice elementare e dove A_k ha le prime $k-1$ colonne in forma triangolare, cioè

$$
A_k = \left[\begin{array}{ccc|ccc}
a^{(k)}_{1,1} & \dots & a^{(k)}_{1,k-1} & a^{(k)}_{1,k} & \dots & a^{(k)}_{1,n} \\
 & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
0 & & a^{(k)}_{k-1,k-1} & a^{(k)}_{k-1,k} & \dots & a^{(k)}_{k,n} \\
\hline
0 & \dots & 0 & a^{(k)}_{k,k} & \dots & a^{(k)}_{k+1,n} \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & \dots & 0 & a^{(k)}_{n,k} & \dots & a^{(k)}_{n,n}
\end{array}\right] =: \left[\begin{array}{c|c} T_k & V_k \\ \hline 0 & W_k \end{array}\right] \tag{2}
$$

dove T_k ha dimensione $(k-1)\times(k-1)$, W_k ha dimensione $(n-k+1)\times(n-k+1)$ e V_k ha dimensione $(k-1)\times(n-k+1)$.

Vediamo il primo passo. Consideriamo la matrice $A = A_1$, denotiamo $a^{(1)}$ la sua prima colonna. Per il teorema 3 esiste una matrice elementare M_1 che trasforma $a^{(1)}$ in un vettore proporzionale al primo vettore $e^{(1)}$ della base canonica di $\mathbb{C}^n$, cioè M_1 è tale che $M_1 a^{(1)} = a^{(2)}_{1,1} e^{(1)}$. Vale allora

$$
M_1 A_1 = \left[\begin{array}{c|c} a^{(2)}_{1,1} & V_2 \\ \hline 0 & W_2 \end{array}\right] =: A_2
$$

dove W_2 è matrice $(n-1)\times(n-1)$ mentre V_2 ha dimensioni $1\times(n-1)$. Cioè mediante la moltiplicazione per M_1 abbiamo iniziato il primo passo del processo di triangolarizzazione di A. Adesso ripetiamo lo stesso procedimento sulla matrice W_2 costruendo una matrice elementare che trasformi la prima colonna di W_2 in un vettore proporzionale al primo versore della base canonica di $\mathbb{C}^{n-1}$. Descriviamo questo processo nella sua generalità.

Supponiamo di avere la matrice A_k e di voler costruire la matrice M_k tale che $A_{k+1} = M_k A_k$ abbia le prime k colonne in forma triangolare. Per questo si consideri una matrice elementare $\widehat{M}_k$ di dimensione $(n-k+1)\times(n-k+1)$ che trasformi la prima colonna di W_k in un vettore proporzionale al primo versore della base canonica di $\mathbb{C}^{n-k+1}$. Tale matrice esiste per il teorema 3. Vale allora

$$
\widehat{M}_k W_k = \left[\begin{array}{c|c} a^{(k+1)}_{k,k} & z^T \\ \hline 0 & W_{k+1} \end{array}\right]
$$

con W_{k+1} di dimensioni $(n-k)\times(n-k)$.

Quindi ponendo

$$
M_k = \left[\begin{array}{c|c} I_{k-1} & 0 \\ \hline 0 & \widehat{M}_k \end{array}\right] \tag{3}
$$

dove I_{k-1} è una matrice identica di ordine $k-1$, si ha

$$
M_k A_k = \left[\begin{array}{c|c} T_k & V_k \\ \hline 0 & \widehat{M}_k W_k \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|cc} T_k & \multicolumn{2}{c}{V_k} \\ \hline \multirow{2}{*}{0} & a^{(k+1)}_{k,k} & z^T \\ \cline{2-3} & 0 & W_{k+1} \end{array}\right] := A_{k+1}
$$

dove A_{k+1} ha la stessa struttura in (2) con k sostituito da $k+1$.

Inoltre la matrice M_k è ancora una matrice elementare essendo $M_k = I - \sigma u v^H$ dove

$$u = \begin{bmatrix} 0 \\ \hat{u} \end{bmatrix}, \qquad v = \begin{bmatrix} 0 \\ \hat{v} \end{bmatrix}.$$

con $\widehat{M}_k = I_{n-k+1} - \sigma \hat{u}\hat{v}^H$.

In questo modo si è realizzato il generico passo del processo di triangolarizzazione di A.

Dopo $n-1$ passi si ottiene la fattorizzazione $A_n = M_{n-1} \cdots M_1 A$, dove A_n è triangolare superiore, da cui si ottiene

$$A = M_1^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1} A_n.$$

Si osservi che per risolvere il sistema lineare $Ax = b$, la tecnica di fattorizzazione appena introdotta può essere utilizzata in due modi diversi ma equivalenti.

- Calcolare e memorizzare ogni singola matrice elementare M_k assieme alla matrice A_n triangolare superiore e alla fine calcolare $y = M_{n-1} \cdots M_1 b$ mediante prodotti successivi, e poi risolvere il sistema triangolare $A_n x = y$.

- Costruire la successione di sistemi equivalenti $A_k x = b^{(k)}$, dove $b^{(k+1)} = M_k b^{(k)}$ e $b^{(1)} = b$, e alla fine risolvere il sistema $A_n x = b^{(n)}$.

La differenza tra i due approcci riguarda solo la tempistica delle operazioni.

Nel secondo caso si applica una strategia usa e getta nel calcolo delle matrici M_k che comporta un ingombro di memoria più basso rispetto al primo approccio.

Computazionalmente i due metodi sono equivalenti visto che entrambi calcolano, anche se in tempi diversi, gli $n-1$ prodotti matrice-vettore $y = b^{(n)} = M_{n-1} \cdots M_1 b$.

6 Metodi di Gauss e di Householder

Se ad ogni passo del metodo descritto sopra si sceglie come M_k una matrice del tipo (3) dove $\widehat{M}_k = I - \hat{\beta}_k \hat{u}^{(k)} \hat{u}^{(k)H}$ è matrice di Householder, allora anche M_k è matrice di Householder essendo $M_k = I - \beta_k u^{(k)} u^{(k)H}$ con

$$u^{(k)} = \begin{bmatrix} 0 \\ \hat{u}^{(k)} \end{bmatrix}$$

e $\beta_k = \hat{\beta}_k$. La fattorizzazione che si ottiene in questo modo è una fattorizzazione QR dove Q è un prodotto di matrici di Householder e quindi è unitaria.

Poiché esiste sempre una matrice di Householder che trasforma un arbitrario vettore in un vettore proporzionale al primo versore della base canonica, la costruzione mostrata può essere sempre portata a termine senza interruzioni.

Questo dimostra in modo costruttivo che la fattorizzazione QR di una matrice esiste sempre.

Scegliendo invece ad ogni passo come matrice elementare la matrice M_k descritta in (3) dove $\widehat{M}_k$ è una matrice di Gauss si arriva alla fattorizzazione LU.

Si osserva che la matrice $\widehat{M}_k$ ha elementi

$$\widehat{M}_k = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ -a_{2,k}^{(k)}/a_{k,k}^{(k)} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -a_{n,k}^{(k)}/a_{k,k}^{(k)} & & & 1 \end{bmatrix}. \tag{4}$$

Diversamente dalle matrici di Householder, l'esistenza della matrice elementare di Gauss è legata alla condizione $a_{k,k}^{(k)} \neq 0$. Infatti se tale condizione non fosse verificata la matrice di Gauss (4) che realizza un passo del processo di triangolarizzazione non esisterebbe in generale. L'elemento $a_{k,k}^{(k)}$ viene chiamato *elemento pivot*.

È possibile verificare agevolmente che se tutte le sottomatrici principali di testa di A di dimensione $k \times k$ sono non singolari per $k = 1, \ldots, n-1$, per cui esiste ed è unica la fattorizzazione LU, allora tutti gli elementi pivot sono diversi da zero e quindi il processo di triangolarizzazione può essere portato a termine senza interruzioni.

Infatti, supponiamo per assurdo che il metodo di fattorizzazione LU appena visto si interrompa al passo k-esimo poiché $a_{k,k}^{(k)} = 0$.

Allora, dalla relazione $A_k = M_{k-1} \cdots M_1 A$, poiché $L_k = M_{k-1} \cdots M_1$è triangolare inferiore si ha che la sottomatrice principale di testa di A_k di dimensione $k \times k$ è uguale alla sottomatrice principale di testa di L_k per la sottomatrice principale di testa di A che è non singolare per ipotesi.

Questo implica che la sottomatrice principale di testa $k \times k$ di A_k è non singolare. Ma questo è assurdo essendo tale matrice triangolare superiore con elementi diagonali $a_{i,i}^{(k)}$ ed essendo $a_{k,k}^{(k)} = 0$.

I metodi per il calcolo della fattorizzazione LU e QR che si ottengono nel modo descritto sono detti rispettivamente metodo di Gauss, o metodo di eliminazione Gaussiana, e metodo di Householder. Una loro analisi computazionale viene svolta nel prossimo articolo Aspetti computazionali dei metodi di Gauss e Householder.

7 Il complemento di Schur

Si partizioni la matrice A nel seguente modo

$$A = \left[\begin{array}{c|c} A_{1,1} & A_{1,2} \\ \hline A_{2,1} & A_{2,2} \end{array}\right]$$

dove $A_{1,1}$ è $k \times k$ e non singolare. La matrice

$$S = A_{2,2} - A_{2,1} A_{1,1}^{-1} A_{1,2}$$

è definita il *complemento di Schur* di $A_{2,2}$ in A. Il complemento di Schur è legato alla fattorizzazione LU di A. Infatti si verifica facilmente che vale la fattorizzazione a blocchi

$$A = \begin{bmatrix} I & 0 \\ A_{2,1}A_{1,1}^{-1} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ 0 & S \end{bmatrix}. \tag{5}$$

Inoltre S coincide con la matrice W_k che compare in (2).

Il complemento di Schur ha proprietà interessanti. Ad esempio, da (5) segue che $\det A = \det A_{1,1} \det S$. Quindi se A è invertibile anche S lo è. Inoltre S^{-1} coincide con la sottomatrice principale di A^{-1} formata dagli indici $i, j > k$.

Riferimenti bibliografici

[1] D. Bini, M. Capovani, O. Menchi. Metodi Numerici per l'Algebra Lineare. Zanichelli, Bologna 1988.