

3

O método Jacobi quaterniônico para matrizes anti-simétricas

3.1

O Método de Jacobi

O uso de reflexões e rotações é computacionalmente interessante pela sua simplicidade e porque podem ser facilmente utilizados para introduzir zeros em um determinado vetor coluna da matriz considerada, apenas escolhendo-se um ângulo ou um plano de rotação apropriados.

Uma classe de métodos baseados em rotações são os chamados *métodos de Jacobi*, originalmente proposto em 1846. A técnica consiste em transformar a matriz original na forma diagonal através de uma seqüência de rotações. Numericamente, o número de rotações que transformam essa matriz na forma diagonal é infinita, muito embora podemos encerrar o processo quando uma determinada precisão é encontrada para os elementos fora da diagonal, ou seja, devemos nos concentrar em diminuir a quantidade:

$$\text{Off}(A) = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1, i \neq j}^n a_{ij}^2} \quad (3-1)$$

Para isso, devemos utilizar rotações da forma:

$$R_k(p, q, \theta) = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & \cos \theta & \dots & \sin \theta & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & -\sin \theta & \dots & \cos \theta & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (3-2)$$

Denotando a matriz original A por A_0 , então o método de Jacobi pode ser descrito de forma a gerar uma seqüência de matrizes A_k de forma a satisfazer:

$$A_k = R_k A_{k-1} R_k^T \quad (3-3)$$

Suponha que o elemento de maior ordem fora da diagonal encontra-se na

posição (p, q) , e com isso a matriz R_k corresponde a uma rotação no plano de posição (p, q) e o ângulo θ é escolhido de forma a anular o elemento (p, q) da matriz A_{k-1} .

Quando escolhermos a linha/coluna (i, j) , $i < j$, temos

$$\begin{cases} \tilde{a}_{ir} = \cos \theta a_{ir} - \operatorname{sen} \theta a_{jr} \\ \tilde{a}_{jr} = \cos \theta a_{jr} + \operatorname{sen} \theta a_{ir} \end{cases} \quad (3-4)$$

se $r \notin \{i, j\}$. O ângulo de rotação das rotações acima podem ser obtido da seguinte forma:

$$\theta = \pm \frac{\pi}{4} \quad \text{se } a_{ii} = a_{jj} \quad (3-5)$$

$$\tan(2\theta) = \frac{2a_{ij}}{a_{jj} - a_{ii}}, \quad \text{caso contrário} \quad (3-6)$$

Temos dois ângulos θ que satisfazem a equação (3-6) abaixo: chamamos θ contido no intervalo $[-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$ como o *menor ângulo*. O outro ângulo é chamado de *maior ângulo*.

Ao considerarmos o menor ângulo, os novos valores para os elementos diagonal são:

$$\begin{cases} \tilde{a}_{ii} = a_{ii} - \tan \theta a_{ij} \\ \tilde{a}_{jj} = a_{jj} + \tan \theta a_{ij} \end{cases} \quad (3-7)$$

se θ é escolhido pelo maior ângulo, temos

$$\begin{cases} \tilde{a}_{ii} = a_{ii} + \tan \theta a_{ij} \\ \tilde{a}_{jj} = a_{ii} - \tan \theta a_{ij} \end{cases} \quad (3-8)$$

Um problema citado por (8) no método clássico de Jacobi está na busca do maior elemento a cada iteração, dando ao algoritmo um tempo médio de $\mathcal{O}(n^2)$. Uma tentativa de melhora nesse algoritmo pode ser obtida através da adoção de uma ordem cíclica por linha, ou seja:

$$(p, q) = \{(1, 2), (1, 3), \dots, (2, 3), (2, 4), \dots, (2, n), \dots, (n-1, n)\}$$

Podemos também considerar um ordem cíclica por coluna.

3.2

Rotações e quatérnios

O estudo das rotações desempenham um importante papel na elaboração do método tipo Jacobi quaterniônico.

Há aproximadamente 150 anos atrás, Cayley começou a utilizar o conceito de quatérnios para estudar rotações. Muitos estudiosos se interessaram pelo assunto mas, somente em 1946, Coxeter em (3) considerou uma rotação como produto de duas reflexões.

Considere o conjunto:

$$S^3 = \{x \in \mathbb{H}; |x| = 1\} \quad (3-9)$$

de todos os quatérnios unitários constituem um grupo com a multiplicação em \mathbb{H} e um subgrupo do grupo multiplicativo (\mathbb{H}, \times) . Seja $\mathcal{GL}_n(\mathbb{R})$ o grupo de todas as matrizes inversíveis de ordem n .

Consideremos também V um espaço vetorial de dimensão finita e munido de produto interno. Uma função linear $f : V \rightarrow V$ é dita *ortogonal*, se:

$$\langle f(x), f(y) \rangle = \langle x, y \rangle \text{ para todo } x, y \in V \quad (3-10)$$

ou seja, se e somente se, a função linear preserva a norma: $|f(x)| = |x|$. Funções ortogonais formam um grupo ortogonal $\mathcal{O}(V)$ do espaço vetorial V . Estas funções possuem determinante com valor ± 1 , isto é:

$$\det f = \pm 1 \text{ quando } f \in \mathcal{O}(V) \quad (3-11)$$

O subgrupo $\mathcal{SO}(V)$, chamada de *funções ortogonais próprias*, é definido por:

$$\mathcal{SO}(V) = \mathcal{O}^+(V) := \{f \in \mathcal{O}(V); \det f = +1\} \quad (3-12)$$

e o subgrupo das *reflexões* é dado por:

$$\mathcal{O}^- := \{f \in \mathcal{O}(V); \det f = -1\} \quad (3-13)$$

e, obviamente, temos $\mathcal{O}(V) = \mathcal{O}^+(V) \cup \mathcal{O}^-(V)$.

Os grupos $\mathcal{O}(\mathbb{R}^n)$ e $\mathcal{SO}(\mathbb{R}^n)$ são denotados por $\mathcal{O}(n)$ e $\mathcal{SO}(n)$, donde podemos escrever: $\mathcal{O}(n) = \{A \in \mathcal{GL}_n(\mathbb{R}); AA^T = A^T A = I_n\}$ e $\mathcal{SO}(n) = \{A \in \mathcal{GL}_n(\mathbb{R}); AA^T = A^T A = I_n \text{ e } \det A = +1\}$.

Teorema 3.2.1 *Cada transformação ortogonal em quatro dimensões é definida por:*

$$x \rightarrow pxq \quad x \rightarrow p\bar{x}q \quad (3-14)$$

onde $x \in \mathbb{H}$ e p, q são quatérnios unitários.

Uma prova detalhada desse teorema encontra-se em (3).

Com base no teorema, podemos definir a seguinte proposição:

Proposição 3.2.2 *A função definida por:*

$$\varphi : \mathcal{S} \times \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{GL}_n(\mathbb{R})$$

$$(p, q) = pv\bar{q}, \quad (3-15)$$

é um homomorfismo, onde a imagem é um elemento de $\mathcal{SO}(\mathbb{H})$ com núcleo $\{(-1, -1), (+1, +1)\}$.

Prova: A função claramente é um homomorfismo, pois:

$$[\varphi(a, b) \circ \varphi(c, d)](x) = \varphi(a, b)(cx\bar{d}) = acx\bar{bd} = \varphi(ac, bd)(x), \quad x \in \mathbb{H}$$

A prova que a imagem da transformação (3-15) é um elemento de $\mathcal{SO}(4)$ está baseada nos teoremas de Cayley e Hamilton, descritos detalhadamente em (6).

Ainda em relação as rotações, devemos enunciar alguns lemas citados em (9):

Lema 3.2.3 *Se p e q são quatérnios unitários, então $(p \otimes q)$ é uma rotação.*

Prova: Observando as matrizes (2-20) e (2-21) concluímos que elas têm determinante positivo e são matrizes ortogonais. Com isso, podemos concluir que $p \otimes 1$, $1 \otimes q$, e $p \otimes q$ são rotações.

Lema 3.2.4 *Se p é um quatérnio puro unitário, então $p \otimes p$ é uma rotação de 180° e seu eixo de rotação passa por p .*

Lema 3.2.5 *Sejam θ e ϕ quatérnios puros e unitários. A rotação*

$$\frac{1 - \theta\phi}{|1 - \theta\phi|} \otimes \frac{1 - \theta\phi}{|1 - \theta\phi|} \tag{3-16}$$

leva ϕ em θ .

Prova: Sabemos que qualquer rotação no espaço tridimensional pode ser escrito como um produto de duas rotações de 180 graus. Considere uma rotação passando pelo eixo bissetor do ângulo formado pelos quatérnios θ e ϕ . Dessa forma, levamos ϕ e θ . Consideremos um vetor perpendicular, γ , a ϕ e θ . Após essa rotação, levamos γ em $-\gamma$. Agora, fazemos uma rotação por θ de 180 graus; isso traz de volta γ em $-\gamma$. Dessa forma, podemos escrever a rotação da forma:

$$(\theta \otimes \theta) \left(\frac{\theta + \phi}{|\theta + \phi|} \otimes \frac{\theta + \phi}{|\theta + \phi|} \right), \tag{3-17}$$

que é igual a

$$\frac{\theta\phi - 1}{|\theta\phi - 1|} \otimes \frac{\theta\phi - 1}{|\theta\phi - 1|} \tag{3-18}$$

finalmente, reescrevendo a equação (3-18), temos:

$$\frac{1 - \theta\phi}{|1 - \theta\phi|} \otimes \frac{1 - \theta\phi}{|1 - \theta\phi|} \tag{3-19}$$

3.3

Redução das matrizes 4×4 anti-simétricas

Baseando-se na teoria descrita no capítulo anterior, podemos escrever um quatérnio como soma direta entre sua parte pura e imaginária, ou seja, induzindo a seguinte decomposição:

$$\mathbb{H} \otimes \mathbb{H} \cong (\mathcal{R} \oplus \mathcal{P}) \otimes (\mathcal{R} \oplus \mathcal{P}) \cong \{(\mathcal{R} \otimes \mathcal{R}) \oplus (\mathcal{P} \otimes \mathcal{P})\} \oplus \{(\mathcal{R} \otimes \mathcal{P}) \oplus (\mathcal{P} \otimes \mathcal{R})\} \quad (3-20)$$

Considere os subespaços $\mathcal{S} = (\mathcal{R} \otimes \mathcal{R}) \oplus (\mathcal{P} \otimes \mathcal{P})$ e $\mathcal{K} = (\mathcal{R} \otimes \mathcal{P}) \oplus (\mathcal{P} \otimes \mathcal{R})$. Podemos observar que o subespaço \mathcal{S} representa as matrizes simétricas e o subespaço \mathcal{K} representa as matrizes anti-simétricas. Observamos que $\dim \mathcal{K} = 6$ e $\dim \mathcal{S} = 10$.

Usando (2-17), podemos escrever:

$$p \otimes q = [p_0(1 \otimes 1) + p_1(i \otimes 1) + p_2(j \otimes 1) + p_3(k \otimes 1)] \otimes [q_0(1 \otimes 1) + q_1(1 \otimes i) + q_2(1 \otimes j) + q_3(1 \otimes k)] \quad (3-21)$$

e dessa forma definimos uma base quaterniônica para $\mathcal{M}_4(\mathbb{R})$, descrita no apêndice [A].

Afim de obter uma matriz similar à matriz anti-simétrica dada inicialmente, precisamos encontrar uma matriz de similaridade $R \in \mathcal{SO}(4)$. Antes de obter tal matriz devemos, entretanto, considerar o seguinte corolário enunciado em (14), baseando-se na proposição 3.2:

Corolário 3.3.1 A função

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^3 &\longrightarrow \mathcal{GL}(\mathcal{R}) \\ x &\mapsto \phi(x \otimes x) \end{aligned}$$

é um homomorfismo de grupos com núcleo $\{1, -1\}$ e imagem no conjunto de todas as matrizes em $\mathcal{SO}(4)$ da forma:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

que pode ser encarado como rotações de $\mathcal{P} \cong \mathcal{R}^3$.

Outro fato já conhecido, está no fato de que uma conjugação em $\mathbb{H} \times \mathbb{H}$ corresponde a uma transposição em $\mathcal{M}_4(\mathbb{R})$ e, com isso, podemos escrever a matriz $R \phi(p, q) R^T$ na forma:

$$(x \otimes y)(p \otimes q)(\bar{x} \otimes \bar{y}) = (xp\bar{x}) \otimes (yq\bar{y})$$

onde, de acordo com o Corolário 3.3, $(xp\bar{x})$ e $(yq\bar{y})$ agem na parte pura dos quatérnios p e q , ou seja, o efeito de uma matriz de similaridade ortogonal 4×4 em uma matriz 4×4 pode ser decomposta na ação de duas matrizes independentes que são rotações em \mathcal{P} .

Lema 3.3.2 (*Caracterização das matrizes reais anti-simétricas*) *A matriz real A , 4×4 , é anti-simétrica se e só se, existirem quatérnios puros π e ψ tais que*

$$A = \pi \otimes 1 + 1 \otimes \psi \tag{3-22}$$

Prova: Observando a equação (3-13), temos que a matriz A é formada como uma combinação linear dos elementos anti-simétricos da base ortonormal de $\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$. Sejam $u, v, w, x, y, z \in \mathbb{R}$, tais que:

$$A = u(i \otimes 1) + v(j \otimes 1) + w(k \otimes 1) + x(1 \otimes i) + y(1 \otimes j) + z(1 \otimes k) = (ui + vj + zk) \otimes 1 + 1 \otimes (xi + yj + zk) \tag{3-23}$$

Com isso, temos que A é anti-simétrica se e só se existirem quatérnios puros, $\phi = u i + v j + w k$ e $\psi = x i + y j + z k$, tais que $A = \phi \otimes 1 + 1 \otimes \psi$.

Substituindo $(i \otimes 1), (j \otimes 1), (k \otimes 1), (1 \otimes i), (1 \otimes j), (1 \otimes k)$ pelas matrizes correspondentes definidas no apêndice [A], temos:

$$\begin{pmatrix} 0 & x - u & y - v & z - w \\ u - x & 0 & -z - w & y + v \\ v - y & z + w & 0 & -u - x \\ w - z & -v - y & u + x & 0 \end{pmatrix} \tag{3-24}$$

donde, a partir dos elementos de A podemos determinar ϕ e ψ e vice-versa.

Teorema 3.3.3 (*Método tipo Jacobi quaterniônico*): *Seja A uma matriz anti-simétrica na forma $p \otimes 1 + 1 \otimes q$ e R a matriz de rotação*

$$\frac{|p| - ip}{||p| - ip|} \otimes \frac{|q| - iq}{||q| - iq|} \tag{3-25}$$

então RAR^{-1} está na forma de Schur.

Com isso, podemos escrever:

$$RK R^T = si \otimes 1 + 1 \otimes ti = \begin{pmatrix} 0 & t - s & 0 & 0 \\ s - t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -s - t \\ 0 & 0 & s + t & 0 \end{pmatrix} \tag{3-26}$$

onde $s = |p|, t = |q|$.

Teorema 3.3.4 *A matriz $R = x \otimes y$ pode ser computado como produto das matrizes:*

$$\frac{1}{\|p - ip\|} \begin{pmatrix} |p| + p_1 & 0 & -p_3 & p_2 \\ 0 & |p| + p_1 & p_2 & p_3 \\ p_3 & -p_2 & |p| + p_1 & 0 \\ -p_2 & -p_3 & 0 & |p| + p_1 \end{pmatrix} \quad (3-27)$$

e

$$\frac{1}{\|q - iq\|} \begin{pmatrix} |q| + q_1 & 0 & q_3 & -q_2 \\ 0 & |q| + q_1 & q_2 & q_3 \\ -q_3 & -q_2 & |q| + q_1 & 0 \\ q_2 & -q_3 & 0 & |q| + q_1 \end{pmatrix} \quad (3-28)$$

onde os quatérnios puros p e q são computados de K via (3-14).

Prova: Como $x = \frac{|\phi| - i\phi}{\| \phi - i\phi \|}$ e $y = \frac{|\psi| - i\psi}{\| \psi - i\psi \|}$ são quatérnios unitários então, pelo lema 3.2, $R = x \otimes y$ é uma rotação. Com isso:

$$RKR^T = (x \otimes y)(p \otimes 1 + 1 \otimes q)(x \otimes y)^T \quad (3-29)$$

e fazendo

$$(|\pi| - i\pi)\pi = |\pi|i(|\pi| - i\pi) \quad (3-30)$$

e da mesma forma para ψ . Com isso, podemos reescrever (3-29) da forma:

$$RKR^T = (p \otimes q)(\pi \otimes 1 + 1 \otimes \psi)(p \otimes q)^{-1} = |\pi|i \otimes 1 + 1 \otimes |\psi|i \quad (3-31)$$

Como $|\phi|i$ e $|\psi|i$ são múltiplos reais de i , RKR^T é uma matriz bloco-diagonal.

3.4

Convergência do método qJ para matrizes bloco anti-simétricas

Considere a matriz A real, anti-simétrica, de ordem n , particionada em $n = 2m$ blocos 2×2 . Tentaremos verificar a velocidade na qual o algoritmos tipo Jacobi quaterniônico converge.

Denotaremos a matriz inicial A por $A^{(0)}$ e consideraremos a matriz resultante da transformação por similaridade no passo k por $A^{(k)}$.

A prova da convergência do método qJ, assintoticamente quadrática, foram publicados em vários trabalhos: em (14), obtemos uma prova para matrizes simétricas; em (9) concentrou-se nas matrizes anti-simétricas e ordens de pivotamento cíclicas e, merecem também grandes ressalvas, o trabalho (20), que obteve resultados baseados em ordens quase-cíclicas. Vamos seguir os caminhos de Hacon e observar a convergência do método tipo Jacobi quaterniônico com ordem cíclica e para o caso onde todos os autovalores são distintos, ou seja, para uma matriz real anti-simétrica, em que todos os autovalores são pares de conjugados complexos, temos os autovalores dados por $\lambda_1 i, -\lambda_1 i, \dots, \lambda_n i, -\lambda_n i$, onde :

$$0 \leq \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n \quad (3-32)$$

Definimos também

$$\delta = \min_{r \neq s} |\lambda_r - \lambda_s| \quad (3-33)$$

Seja A particionada em blocos 2×2 :

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ A_{n1} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix} \quad (3-34)$$

Consideremos também a matriz do elementos “fora da diagonal”, $\text{Off}(A)$

$$\text{Off}(A) = \begin{pmatrix} 0 & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (3-35)$$

Considere os seguintes lema e teorema descrito em (9):

Lema 3.4.1 *Suponha a primeira rotação da ordem cíclica do método tipo Jacobi quaterniônico, que anula os elementos A_{12} e A_{21} , que transforma a matriz $A^{(0)}$ em $A^{(1)}$. Então, para $m \neq 1, 2$,*

$$\|A_{1m}^{(1)}\| \leq \|A_{1m}^{(0)}\| + \frac{\|A_{12}^{(0)}\| \|A_{2m}^{(0)}\|}{\epsilon}, \quad (3-36)$$

onde $\epsilon = \delta - \|\text{Off}(A)\|$.

Prova: Consideremos:

$$B = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \pi \otimes 1 + 1 \otimes \psi = \begin{pmatrix} 0 & x-u & y-v & z-w \\ u-x & 0 & -w-z & v+y \\ v-y & w+z & 0 & -u-x \\ w-z & -v-y & u+x & 0 \end{pmatrix} \quad (3-37)$$

onde $\pi = ui + vj + wk$ e $\psi = xi + yj + zk$, onde $u, x \geq 0$. A primeira rotação

$R = p \otimes q$

Fazendo $Q = \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix}$, temos $B_{12} = 0 = B_{21}$, e para $m \neq 1, 2$, temos

$$\begin{pmatrix} B_{1m} \\ B_{2m} \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} A_{1m} \\ A_{2m} \end{pmatrix} \quad (3-38)$$

para as demais linhas, temos que $B_{lm} = A_{lm}$, para $l, m \neq 1, 2$, e com isso, temos:

$$\sum_l \|B_{lm}\|^2 = \sum_l \|A_{lm}\|^2 \quad (3-39)$$

Outra informação importante é que $\text{Off}(A) \geq \text{Off}(B)$, pois,

$$\|\text{Off}(A)\|^2 = \|\text{Off}(B)\|^2 + \|A_{12}^{(0)}\|^2 + \|A_{21}^{(0)}\|^2 \quad (3-40)$$

o que equivale a

$$\|\text{Off}(B)\|^2 = \|\text{Off}(A)\|^2 - 2\|A_{12}^{(0)}\|^2 \quad (3-41)$$

Escrevendo a matriz de rotação $R = p \otimes q$ da forma:

$$p \otimes 1 = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad 1 \otimes q = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \quad (3-42)$$

A primeira rotação da ordem cíclica transforma

$$\begin{pmatrix} A_{1m} \\ A_{2m} \end{pmatrix}$$

em

$$\begin{pmatrix} B_{1m} \\ B_{2m} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{1m} \\ A_{2m} \end{pmatrix} \quad (3-43)$$

Donde obtemos

$$B_{1m} = (P_{11}Q_{11} + P_{12}Q_{21})A_{1m} + (P_{11}Q_{12} + P_{12}Q_{22})A_{2m} \quad (3-44)$$

com isso,

$$\|B_{1m}\| \leq |P_{11}||Q_{11}|\|A_{1m}\| + \dots + |P_{12}||Q_{22}|\|A_{2m}\| \quad (3-45)$$

Como

$$|P_{11}|^2 + |P_{12}|^2 = 1 \quad \text{pois} \quad |p| = 1 \quad \text{e} \quad |Q_{11}|^2 + |Q_{21}|^2 = 1 \quad \text{pois} \quad |q| = 1 \quad (3-46)$$

Com isso, temos $|P_{11}||Q_{11}| + |P_{12}||Q_{21}| \leq 1$. Dessa forma, temos

$$\|B_{1m}\| \leq \|A_{1m}\| + (|P_{12}| + |Q_{12}|)\|A_{2m}\| \quad (3-47)$$

Das fórmulas de p e q

$$|P_{12}| \leq \frac{\sqrt{v^2 + w^2}}{|\pi| + u} \quad \text{e} \quad |Q_{12}| \leq \frac{\sqrt{y^2 + z^2}}{|\psi| + x} \quad (3-48)$$

Dessa forma,

$$|P_{12}| + |Q_{12}| \leq \frac{\sqrt{v^2 + w^2}}{2u} + \frac{\sqrt{y^2 + z^2}}{2x} \quad (3-49)$$

Para mostrar que x e u não são tão pequenos, consideremos αi , βi como autovalores de A (onde α e β são reais) tal que, para δ definido em (3-32), temos:

$$\beta - \delta \geq \alpha \geq 0 \quad (3-50)$$

e

$$(u - x - \alpha)^2 + (u + x - \beta)^2 \leq \frac{1}{2}\|\text{Off}(A)\|^2 \quad (3-51)$$

Interpretando em termos da distância no plano, a distância entre (α, β) e $(u - x, u + x)$ é quase

$$\frac{\|\text{Off}(A)\|}{\sqrt{2}} \tag{3-52}$$

Projetando sobre a linha $x + y = 0$, segue-se que

$$\frac{|2x|}{\sqrt{2}} \geq \frac{|\beta - \alpha|}{\sqrt{2}} - \frac{\|\text{Off}(A)\|}{\sqrt{2}} \tag{3-53}$$

e com isso,

$$x \geq \frac{\varepsilon}{2} \quad \text{e} \quad u \geq \frac{\varepsilon}{2}$$

Se $x \geq u \geq 0$, e já foi provado que $u \geq \frac{\varepsilon}{2}$. Então

$$\|B_{1m}\| \leq \|A_{1m}\| + \frac{\sqrt{v^2 + w^2} + \sqrt{y^2 + z^2}}{\varepsilon} \|A_{2m}\| \leq \|A_{1m}\| + \frac{\sqrt{2}}{\varepsilon} (\sqrt{v^2 + w^2 + y^2 + z^2}) \|A_{2m}\|, \tag{3-54}$$

Com isso,

$$\|B_{1m}\| \geq \|A_{1m}\| + \frac{\|A_{12}\| \|A_{2m}\|}{\varepsilon}. \quad \square \tag{3-55}$$

Teorema: Seja A uma matriz anti-smétrica com autovalores distintos. Suponha a primeira iteração do método de Jacobi que transforma a matriz $A^{(0)}$ a matriz $A^{(1)}$. Isto fornece

$$\|\text{Off}(A^{(1)})\| \leq \frac{\|\text{Off}(A^{(0)})\|^2}{\sqrt{2}\varepsilon} \tag{3-56}$$

Prova: Com (3-55) disponível, seguiremos a prova do Teorema. Enquanto as iterações continuam, δ permanece inalterado e $\|\text{Off}(A)\|$ não aumenta, e por isso, podemos usar o mesmo ε em cada iteração do método.

Provaremos (3-56) para $n = 5$. A iteração transforma $A^{(0)}$ em $A^{(k)}$, após uma seqüência de $(k + 1)$ iterações consecutivas, como segue:

$$A = \begin{pmatrix} S_0 & A_0 & B_0 & C_0 & D_0 \\ \dots & T_0 & E_0 & F_0 & G_0 \\ \dots & \dots & U_0 & H_0 & I_0 \\ \dots & \dots & \dots & V_0 & J_0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & W_0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} S_1 & 0 & B_1 & C_1 & D_1 \\ \dots & T_1 & E_1 & F_1 & G_1 \\ \dots & \dots & U_0 & H_0 & I_0 \\ \dots & \dots & \dots & V_0 & J_0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & W_0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow$$

$$\rightsquigarrow \begin{pmatrix} S_2 & A_2 & 0 & C_2 & D_2 \\ \dots & T_1 & E_2 & F_1 & G_1 \\ \dots & \dots & U_1 & H_1 & I_1 \\ \dots & \dots & \dots & V_0 & J_0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & W_0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} S_3 & A_3 & B_3 & 0 & D_3 \\ \dots & T_1 & E_2 & F_2 & G_1 \\ \dots & \dots & U_1 & H_2 & I_1 \\ \dots & \dots & \dots & V_1 & J_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & W_0 \end{pmatrix} \rightsquigarrow$$

$$\begin{aligned}
 & \rightsquigarrow \begin{pmatrix} S_4 & A_4 & B_4 & C_4 & 0 \\ \dots & T_1 & E_2 & F_2 & G_2 \\ \dots & \dots & U_1 & H_2 & I_2 \\ \dots & \dots & \dots & V_1 & J_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & W_1 \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} S_4 & A_5 & B_5 & C_4 & 0 \\ \dots & T_2 & 0 & F_3 & G_3 \\ \dots & \dots & U_2 & H_3 & I_3 \\ \dots & \dots & \dots & V_1 & J_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & W_1 \end{pmatrix} \rightsquigarrow \\
 & \rightsquigarrow \begin{pmatrix} S_4 & A_7 & B_6 & C_6 & D_5 \\ \dots & T_4 & E_6 & F_6 & 0 \\ \dots & \dots & U_3 & 0 & I_5 \\ \dots & \dots & \dots & V_3 & J_5 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & W_2 \end{pmatrix} \rightsquigarrow \begin{pmatrix} S_4 & A_7 & B_7 & C_6 & D_6 \\ \dots & T_4 & E_7 & F_6 & G_5 \\ \dots & \dots & U_4 & H_6 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & V_3 & J_6 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & W_3 \end{pmatrix} \rightsquigarrow \\
 & \rightsquigarrow \begin{pmatrix} S_4 & A_7 & B_7 & C_7 & D_7 \\ \dots & T_4 & E_7 & F_7 & G_7 \\ \dots & \dots & U_4 & H_7 & I_7 \\ \dots & \dots & \dots & V_4 & J_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & W_4 \end{pmatrix} = A^{(k+1)}
 \end{aligned}$$

Aplicando (3-54) três vezes, temos

$$\|A_4\| \geq \frac{\|B_1\|}{\varepsilon} \|E_1\| + \frac{\|C_2\|}{\varepsilon} \|F_1\| + \frac{\|D_3\|}{\varepsilon} \|G_1\| \quad (3-57)$$

Da mesma forma,

$$\|B_4\| \leq \frac{\|C_2\|}{\varepsilon} \|H_1\| + \frac{\|D_3\|}{\varepsilon} \|I_1\| \quad \text{e} \quad \|C_4\| \leq \frac{\|D_3\|}{\varepsilon} \|J_1\| \quad (3-58)$$

Por essa razão,

$$\|A_4\|^2 + \|B_4\|^2 + \|C_4\|^2 \leq \frac{1}{\varepsilon^2} (\|B_1\|^2 + \|C_2\|^2 + \|D_3\|^2) (\|E_1\|^2 + \|F_1\|^2 + \|G_1\|^2) \quad (3-59)$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{\varepsilon^2} (\|C_2\|^2 + \|D_3\|^2) (\|H_1\|^2 \|I_1\|^2) + \frac{1}{\varepsilon^2} (\|D_3\|^2) (\|J_1\|^2) \\
 & \leq \frac{1}{\varepsilon^2} (\|B_1\|^2 + \|C_2\|^2 + \|D_3\|^2) (\|E_1\|^2 + \|F_1\|^2 + \|G_1\|^2 + \|H_1\|^2 + \|I_1\|^2 + \|J_1\|^2)
 \end{aligned}$$

Seguindo a estratégia de (25), ao final da última iteração, temos:

$$\frac{1}{2} \|\text{Off}(A^{(k)})\|^2 \leq \frac{\|\text{Off}(A)\|^2}{2\varepsilon^2} \cdot \frac{\|\text{Off}(A)\|^2}{2} \quad (3-60)$$

Dessa forma, para autovalores distintos, temos que a convergência para ordens cíclicas é assintoticamente quadrática.

3.5

Resultados numéricos

O método tipo Jacobi quaterniônico para matrizes anti-simétricas pode ser facilmente implementado para ordens superiores ou iguais a 4.

Nessa seção iremos apresentar alguns resultados numéricos obtidos através da execução do algoritmo.

A implementação do algoritmo foi codificado utilizando a linguagem C em uma máquina com sistema operacional Windows Xp ¹ com processador Intel Pentium 4 e 1 GB de memória RAM.

Eis abaixo o pseudocódigo:

ALGORITMO qJ

Entrada: Matriz anti-simétrica de ordem ≥ 4

Saída: Matriz de entrada na forma de Schur

Início do Algoritmo

```
1   iteração  $\leftarrow$  0
2   Enquanto (iteração < numeroIteracoesMaxima) Faça
3       Escolher bloco-pivô na ordem cíclica
4       Determinar a matriz de rotação  $R = p \otimes q$ 
5       Calcular a matriz  $RAR^T$ 
6       Se (Norma  $\leq$  PrecisaoDesejada) Então
7           Sai do Enquanto
8       Fim Se
9       iteracao  $\leftarrow$  iteracao + 1
10  Fim Enquanto
```

Fim do Algoritmo

O método tipo Jacobi quaterniônico foi executado, para cada ordem, 100 iterações. As matrizes utilizadas como massa de teste possuem seus elementos gerados aleatoriamente no intervalo $[-100, +100]$.

¹sistema desenvolvido pela Microsoft Corporation ©

Eis os resultados obtidos:

No Iterações	Ordem 4		Ordem 10		Ordem 50		Ordem 100	
	Precisão	Tempo	Precisão	Tempo	Precisão	Tempo	Precisão	Tempo
1	5.514e-12	0.00''	2.554e4	0.00''	1.216e5	1.58''	2.519e5	50.45''
2	4.547e-12	0.00''	3.350e3	0.00''	1.670e4	3.16''	5.659e4	100.94''
3	4.547e-12	0.00''	3.640e2	0.00''	4.197e3	4.75''	9.209e3	151.44''
4	4.547e-12	0.00''	3.680e-2	0.00''	9.570e2	6.31''	3.725e3	201.78''
5	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.00''	4.688e1	7.88''	3.745e2	252.14''
10	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.00''	1.37e-10	15.75''	3.469e-10	503.89''
20	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.02''	1.37e-10	31.50''	3.469e-10	1007.61''
30	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.03''	1.37e-10	52.16''	3.469e-10	1578.19''
40	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.06''	1.37e-10	82.11''	3.469e-10	2521.00''
50	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.08''	1.37e-10	111.95''	3.469e-10	3464.25''
60	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.09''	1.37e-10	141.73''	3.469e-10	4414.67''
70	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.11''	1.37e-10	171.50''	3.469e-10	5367.41''
80	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.13''	1.37e-10	201.19''	3.469e-10	6321.83''
90	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.14''	1.37e-10	230.91''	3.469e-10	7333.45''
100	4.547e-12	0.00''	1.497e-11	0.16''	1.37e-10	260.72''	3.469e-10	8339.58''

Tabela 3.1: Precisão obtida no decorrer do tempo de execução do algoritmo tipo Jacobi quaterniônico para matrizes cujos elementos foram gerados aleatoriamente

A convergência do algoritmo tipo Jacobi quaterniônico para o caso anti-simétrico foi provada assintoticamente quadrática para ordens cíclicas em (9) e para ordens quase-cíclicas em (20). Abaixo, temos a convergência para matrizes de ordens 10, 50 e 100:

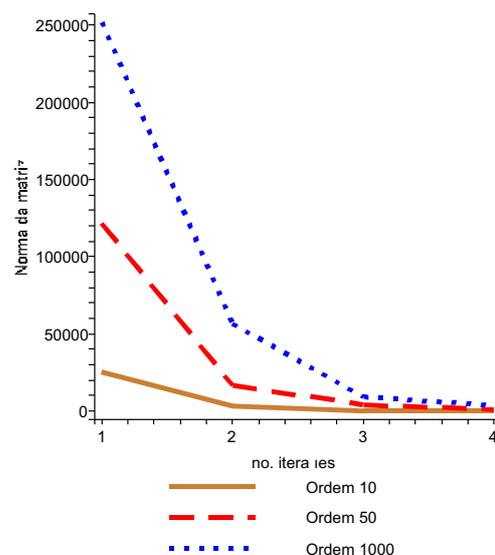


Figura 3.1: Convergência para uma matriz de ordem 100 utilizando o método qJ

Podemos também realizar uma comparação de execução do método tipo Jacobi quaterniônico com outros métodos comumente utilizados para a obtenção dos autovalores de uma matriz (anti-simétrica). Um método bastante utilizado atualmente é o método *QR*, criado em 1961 por J. G. F. Francis, publicado em um artigo chamado “The *QR* Transformation”, publicado pela Computer J., volume 4. O método consiste no seguinte:

Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Então a decomposição

$$A = QR \tag{3-61}$$

onde Q é ortogonal e R é uma matriz triangular superior é chamada de decomposição *QR*.

Segundo (10), podemos definir um algoritmo iterativo através da decomposição *QR*, produzindo sucessivamente a matriz A através de transformações similares, reduzindo assim a matriz inicial à matriz na forma de Schur.

Dessa forma, considere $A_0 = Q_0R_0$, onde Q_0 é unitária e R_0 é uma matriz triangular superior. Em seguida, calculamos $A_1 = R_0Q_0$. Novamente, fazemos $A_1 = Q_1R_1$ até que a precisão desejada seja obtida e/ou um determinado número de iterações sejam realizados.

Norma	ordem 4				ordem 10			
	qJ		QR		qJ		QR	
	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
$\leq 10^{-1}$	1	0.00”	5	0.02”	4	0.00”	28	0.02”
$\leq 10^{-7}$	1	0.00”	11	0.02”	5	0.00”	53	0.02”
$\leq 10^{-8}$	1	0.00”	12	0.02”	5	0.00”	58	0.04”
$\leq 10^{-9}$	1	0.00”	13	0.02”	5	0.00”	61	0.04”
$\leq 10^{-10}$	1	0.00”	14	0.02”	5	0.00”	66	0.04”
$\leq 10^{-11}$	1	0.00”	15	0.02”	5	0.00”	-	-
$\leq 10^{-12}$	1	0.00”	-	-	-	-	-	-

Tabela 3.2: Comparação de execução entre o método qJ e o método QR clássico para matrizes de ordens 4 e 10

Norma	ordem 50				ordem 100			
	qJ		QR		qJ		QR	
	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
$\leq 10^{-1}$	6	8.92”	420	2.6”	7	357.45”	7129	441.42”
$\leq 10^{-7}$	7	10.42”	891	5.8”	8	408.51”	12709	808.55”
$\leq 10^{-8}$	7	10.42”	970	6.27”	8	408.51”	13641	874.25”
$\leq 10^{-9}$	7	10.42”	1048	6.74”	8	408.51”	-	-

Tabela 3.3: Comparação de execução entre o método qJ e o método QR clássico para matrizes de ordens 50 e 100

Através da observação das tabelas (3.2) e (3.3) podemos concluir que o método qJ tem uma execução que converge mais rapidamente para a precisão desejada que o método QR clássico. Quanto maior a ordem da matriz, maior será a diferença do tempo de precisão entre o método qJ e o método QR .

Em razão da grande diferença entre o tempo de execução existente entre o método qJ e o método QR para um determinada precisão, podemos efetuar uma comparação utilizando uma tentativa de aceleração de convergência do método QR : o método QR via reflexões de Householder. Dessa forma, podemos ter uma melhor compreensão entre a execução do método qJ e o método QR .

Tal alternativa consiste em utilizar um vetor unitário e , a partir do mesmo, construir uma matriz simétrica e ortogonal. As transformações de Householder são bastante utilizadas também em problemas que envolvem mínimos quadrados, cálculo computacional de bases ortonormais, etc.

Geometricamente, multiplicar uma matriz de Householder por um vetor x é equivalente a refletir o vetor x através do plano perpendicular a w .

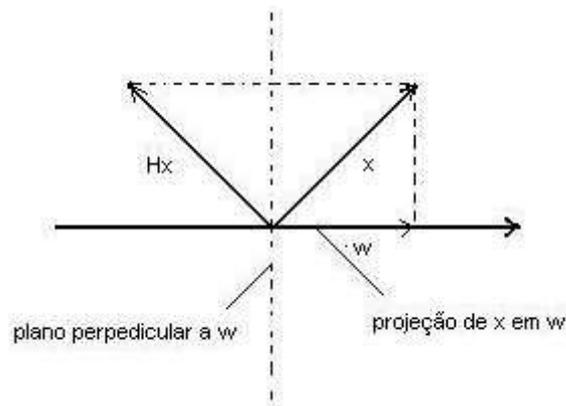


Figura 3.2: Hx é uma reflexão de Householder do vetor x através do plano perpendicular a w

Norma	ordem 4				ordem 10			
	qJ		QR Householder		qJ		QR Householder	
	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
$\leq 10^{-1}$	1	0.00"	5	0.00"	4	0.00"	28	0.00"
$\leq 10^{-7}$	1	0.00"	11	0.00"	5	0.00"	53	0.02"
$\leq 10^{-8}$	1	0.00"	12	0.00"	5	0.00"	58	0.02"
$\leq 10^{-9}$	1	0.00"	13	0.00"	5	0.00"	61	0.02"
$\leq 10^{-10}$	1	0.00"	14	0.00"	5	0.00"	66	0.03"
$\leq 10^{-11}$	1	0.00"	15	0.00"	5	0.00"	-	-
$\leq 10^{-12}$	1	0.00"	-	-	-	-	-	-

Tabela 3.4: Comparação de execução entre o método qJ e o método QR Householder para matrizes de ordens 4 e 10

Norma	ordem 50				ordem 100			
	qJ		QR Householder		qJ		QR Householder	
	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo	Iterações	Tempo
$\leq 10^{-1}$	6	0.00"	420	2.61"	7	357.45"	6852	438.59"
$\leq 10^{-7}$	7	10.42"	891	5.62"	8	408.51"	12709	845.22"
$\leq 10^{-8}$	7	10.42"	970	6.19"	8	408.51"	13641	902.05"
$\leq 10^{-9}$	7	10.42"	1047	6.45"	8	408.51"	-	-
$\leq 10^{-10}$	7	10.42"	-	-	8	408.51"	-	-

Tabela 3.5: Comparação de execução entre o método qJ e o método QR Householder para matrizes de ordens 50 e 100