Instituto Tecnológico Autónomo de México

Optimización y computo paralelo

Trabajo Final

Solución de Mínimos Cuadrados con Factorización QR Vía Transformaciones de Householder

Alumnas:
Mónica Ballesteros 124960
Fabiola Cerón 36027
Ariana López 160281

Profesores:
Erick Palacios

23 de mayo de 2017

Índice

Lista de Tablas

Lista de Figuras

1. Objetivo y Justificación

Objetivos:

Investigar e implementar la solución al problema de mínimos cuadrados con factorización QR vía transformaciones de Householder, considerando los siguientes alcances:

- Realizar una investigación sobre la teoría matemática que sustenta la factorización QR, los diversos métodos para su cálculo, en particular el de transformaciones de Householder y su utilización para solucionar un problema de mínimos cuadrados.
- Desarrollar un código secuencial en lenguaje C donde se realice una descomposición QR vía reflexiones de Householder y se utilice para solucionar mínimos cuadrados.

Justificación:

La técnica o método de análisis numérico conocido mínimos cuadrados tiene diversas aplicaciones como solucionar sistemas de ecuaciones lineales e invertir matrices.
Es común encontrarnos en situaciones en los que suponemos que existe una relación lineal entre variables, el método de mínimos cuadrados nos permite determinar la relación lineal analítica que mejor se aproxima a los datos observados.
El problema que resuelve mínimos cuadrados es de optimización matemática, que consiste en $min_{x \in \mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2$ con $A \in \mathbb{R}^{mxn}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $m > n$.
El método de mínimos cuadrados podría ser resuelto por ecuaciones normales, sin embargo, las motivaciones para usar QR vía Householder son:

- El método es estable hacia atrás.
- No es necesario calcular la forma explícita de Q.
- Debido a la propiedades que tienen los reflectores elementales, es posible utilizar las transformaciones de Householder para hacer ceros de forma estructurada por debajo de un elemento de la matriz.

. **(*********poner propiedades en la teoría)**

2. Introducción

Las transformaciones de Householder fueron introducidas por Alston Scott Householder (matemático estadounidense de la universidad de Chicago) en 1958. El uso de las matrices de transformación resulta ventajoso en algoritmos matemáticos dadas las propiedades de estas, lo que las convierte en una poderosa herramienta.

3. Marco Teórico

3.1. Reflexiones Householder

Una reflexión de Householder es una transformación que toma un vector y lo reflecta sobre un plano o hiperplano. Dado $A \in R^{mxn}$ con $m >= n$, el siguiente algoritmo calcula las matrices $H_1 ... H_n$ tal que si $Q = H_1 ... H_n$, entonces $Q^T A = R$ es una superior triangular. Esta parte superior triangular de A esta sobre escrita por la parte superior triangular de R y los componentes $j+1 : m$ del *j-ésimo* vector Householder esta almacenado en $A(j+1 : m, j) j < m$ [1]

Propiedades: No es necesario invertir las matrices, el $det(R) = 1$ hace que tengan buena estabilidad numérica

Algorithm 1 Cálculo matrices Householder H

for $j = 1 : n$ **do**
    $(v, \beta) = house(A(j : m, j))$
    $A(j : m, j : n) = (I - \beta v v^T) A(j : m, j : n)$
    if $j < m$ **then**
        $A(j+1 : m, j) = v(2 : m - j + 1)$
    end if
end for

Este algoritmo requiere $2n^2(m - n/3)$ flops p.250

Algorithm 2 Algoritmo Vector Householder

procedure FUNCTION(v, β)= house(x) ▷ Definición
  $m = length(x), \sigma = x(2:m)^T x(2:m), v = \binom{1}{x(2:m)}$
  if $\sigma = 0$ and $x(1) >= 0$ **then**
    $\beta = 0$
  else if $\sigma = 0$ and $x(1) < 0$ **then**
    $\beta = -2$
  else
    $\mu = \sqrt{x(1)^2 + \sigma}$
    if $x(1) <= 0$ **then**
      $v(1) = x(1) - \mu$
    else
      $v(1) = -\sigma/(x(1) + \mu)$
    end if
    $\beta = 2v(1)^2/(\sigma + v(1)^2)$
    $v = v/v(1)$
  end if
end procedure

3.2. Factorización QR

En álgebra lineal, una descomposición QR de una matriz es la factorización de una matriz A en un producto $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$ de una matriz ortogonal $\boldsymbol{Q}$ y una triangular superior $\boldsymbol{R}$. La descomposición QR es frecuentemente usada para resolver problemas de mínimos cuadrados.
Existen diversos métodos para calcular una descomposición QR como: *Gram-Schmidt, Rotaciones de Givens y Reflexiones de Householder*. En este documento profundizaremos en las Reflexiones de Householder.

Complejidad:
Para dar una referencia sobre la complejidad computacional necesaria para este método, la *tabla 1* muestra el número de operaciones en el k-esimo paso de la descomposición QR por reflexiones de Householder, asumiendo una matriz cuadrada de tamaño n:

Tabla 1: Número de operaciones descomposición QR por Householder

Operación	Numero de operaciones en el k-ésimo paso
Multiplicación	$2(n-k+1)^2$
Adición	$2(n-k+1)^2+(n-k+1)(n-k)+2$
División	1
Raíz cuadrada	1

Sumando estas a lo largo de los n-1 pasos (para una matriz cuadrada de tamaño n) , la complejidad del algoritmo (en términos de multiplicaciones de punto flotante) esta dado por:

3.3. Mínimos Cuadrados

4. Algoritmo Secuencial

5. Aplicación y Resultados

6. Conclusiones

Referencias

[1] Gene H. Golub and Charles F. Van Loan. *Matrix Computations (3rd Ed.)*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, USA, 1996.