Decomposição QR

Renato Martins Assunção

DCC - UFMG

2016

Decomposição QR

- Útil para:
  - Obter o ajuste de quadrados mínimos.
  - Obter autovalores e autovetores.

- Regressão de mínimos quadrados:
  - Mais linhas que colunas em X.
  - Colunas em X são linearmente independentes.

$$\underset{nx1}{\boxed{y}} \approx \underset{nxp}{\boxed{X}}\ \underset{px1}{\boxed{p}} \quad \Longrightarrow posto\,(x) = p$$

Mais rigorosamente:

- $\hat{\beta}$ = valor que minimiza $\|y - X.p\|^2$
- Solução: $\hat{\beta}$ é o vetor solução das equações normais:

$$\underset{pxp}{(X'X)}\ \underset{px1}{\hat{\beta}} = \underset{px1}{(X'y)} \Longrightarrow \hat{\beta} = (X'X)^{-1}(X'y)$$

- Equações normais: apenas um sistema linear do tipo $A \cdot p = c$ onde A é simétrica e definida positiva.
- Podemos resolver as equações normais usando Cholesky.

Resolvendo por Cholesky

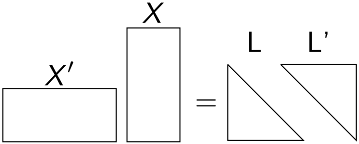
- Se A é simétrica e definida positiva então:

$$A = LL' \; onde \; L = \; \rightarrow \text{é triangular inferior}$$

- Equações normais:

$$(X'X)\,\hat{\beta} = X'y$$
$$(X'X) = A_{pxp} \rightarrow \text{simétrica e def. positiva}$$

Então: $(X'X) =$



Resolvendo por Cholesky

$$Temos\ então:\ \underset{pxp}{(X'X)}\ \underset{px1}{\hat{\beta}} = \underset{px1}{X'y} \longrightarrow \quad =$$

$$e\ portanto:\ (LL')\,\hat{\beta} = X'y$$

$$ou \qquad L\left(L'\hat{\beta}\right) = X'y \rightarrow \overset{L}{\ } \underbrace{\left(\overset{L'}{\ }\ \hat{\beta}\right)}_{\gamma} =$$

- Quebramos o problema em **DOIS** sistemas triangulares:

$\gamma =$ e depois: $\hat{\beta} = \gamma$

Solução em SciLab

- A solução do primeiro sistema em SciLab num problema de regresão linear:

  R = chol $\left(X'X\right)$; (é a triangular superior)

  gama = R'\ $\left(X'y\right)$;

- Em seguida resolvemos o outro sistema triangular:

  beta = R\gama;

- Ou juntando tudo em um único comando:

  R = chol $\left(X'X\right)$;

  beta = $R\backslash\left(R'\backslash\left(X'y\right)\right)$;

- É conhecido que formar a matriz $(X'X)$ para calcular a decomposição de Cholesky pode levar a problemas númericos.
- Uma solução estável é utilizar a decomposição QR de X.
- Veremos como usar essa decomposição agora.

Decomposição QR

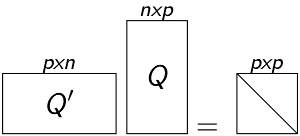
- Dada uma matriz $\boxed{X_{nxp}}$ com $p < n$ (mais linhas que colunas) e colunas linearmente independentes.

- Podemos encontrar duas matrizes tais que: $X = QR$, onde R é com diagonal $\neq 0$.

  $\boxed{X_{nxp}} = \boxed{Q_{nxp}}\ {pxp}$ onde as colunas de Q são $\perp$'s entre si e possuem <u>comprimento</u> 1 (ortonormais).

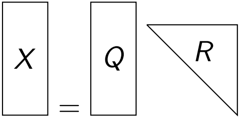
- Colunas de Q são $\perp$'s entre si:

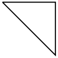
Portanto, $Q'Q =$



$\rightarrow$ *Matriz diagonal*

- Além disso como as colunas possuem $\underline{\text{comprimento} = 1}$ então: $Q'Q = \mathrm{I}_{pxp}$
- Como usamos isso para resolver as equações normais?

- Suponha que: 

, onde $Q'Q = I_{pxp}$ e R é  com diagonal $\neq 0$.
- Equações normais:

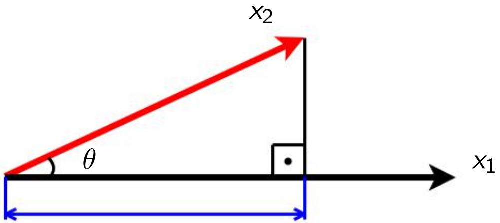
$$\left(X'X\right)\beta = X'y$$
$$\left((QR)'(QR)\right)\beta = (QR)'y$$
$$\left(R'\underbrace{Q'Q}_{I}R\right)\beta = R'Q'y$$

$$R'R\beta = R'Q'y$$
$$\underbrace{R}_{triang.}\beta = Q'y \ \left(pois\ R\ \acute{e}\ invers\acute{\imath}vel\right)$$

OK: Se tivermos a decomposição $X = QR$ com $Q'Q = I$ e R inversível,já sabemos como usá-la para obter $\hat{\beta}$ numa regressão.

- Mas como obter $X = QR$?
- Existe mais de uma maneira de obter.
- Vamos ver o algoritmo baseado na ortogonalização de Gram-Schmidt.
- $\begin{bmatrix} | & | & \\ x_1 & x_2 & \cdots \\ | & | & \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} | & | & \\ q_1 & q_2 & \cdots \\ | & | & \end{bmatrix} \longleftarrow$ Colunas ortonormais gerando o mesmo conjunto de combinações lineares que as colunas de X

Projeção Ortogonal



Comprimento da projeção de x_1 em x_2.

$$
\begin{aligned}
&= \|x_2\| \cdot |\cos\theta| \\
&= \|x_2\| \cdot \frac{x_2 \cdot x_1}{\|x_2\| \cdot \|x_1\|} \\
&= \frac{x_2 \cdot x_1}{\|x_1\|}
\end{aligned}
$$

- O vetor projetado está na direção de x_1 e tem comprimento $= \dfrac{x_2 \cdot x_1}{\|x_1\|}$

- Portanto o vetor projetado é $\frac{x_2 \cdot x_1}{\|x_1\|} \underbrace{\left(\frac{x_1}{\|x_1\|}\right)}_{\text{vetor unitário na direção } x_1}.$

- Em resumo:

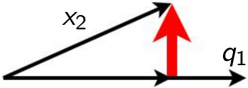
$$\frac{x_2 \cdot x_1}{\|x_1\|^2} x_1 = \frac{x_2' \cdot x_1}{x_1' \cdot x_1} x_1$$

Gram-Schmidt

$X = [x_1, x_2, x_3, \ldots, x_p] \leftarrow$ colunas de X.

$q_1 = \dfrac{x_1}{\|x_1\|} =$ vetor na direção de x_1 e de comprimento $= 1$.

$$
\begin{aligned}
q_2 &= x_2 - (\textit{proj. de } x_2 \textit{ em } q_1) \longrightarrow \\
&= x_2 - \frac{x_2' \cdot q_1}{q_1' \cdot q_1} q_1 \\
&= x_2 - \left(x_2' \cdot q_1\right) q_1, \quad \textit{pois } \|q_1\| = 1
\end{aligned}
$$



$\Rightarrow$Exercício: Mostre que $q_1 \perp q_2$.

- Em seguida, normalize q_2:

$$q_2 = \frac{q_2}{\|q_2\|}$$

- Obtenha agora $q_3 \perp \{q_1, q_2\}$:

$$\begin{aligned} q_3 &= x_3 - (proj. \perp de\ x_3\ em\ q_2) - (proj. \perp de\ x_3\ em\ q_1) \\ &= x_3 - \left(x_3' \cdot q_2\right) q_2 - \left(x_3' \cdot q_1\right) q_1 \end{aligned}$$

$\Rightarrow$Exercício: Mostre que $q_3 \perp q_2$ e $q_3 \perp q_1$.

- Em seguida, normalize q_3:

$$q_3 = \frac{q_3}{\|q_3\|}.$$

- Prossiga desta forma:

$$
\begin{aligned}
q_4 = x_4 &- (proj. \perp de\ x_4\ em\ q_3) - (proj. \perp de\ x_4\ em\ q_2) - \\
&(proj. \perp de\ x_4\ em\ q_1\ ) \\
&= x_4 - \left(x_4' \cdot q_3\right) q_3 - \left(x_4' \cdot q_2\right) q_2 - \left(x_4' \cdot q_1\right) q_1
\end{aligned}
$$