Máster Universitario en Computación en la Nube y de Altas Prestaciones

Modelado de Problemas en Ingeniería Mediante Computación de Altas Prestaciones

Tema 2

El problema lineal de mínimos cuadrados: caso de rango completo.

Bibliografíapara el Tema 2:

- *“Matrix Computations”. G.Golub & C.Van Loan*

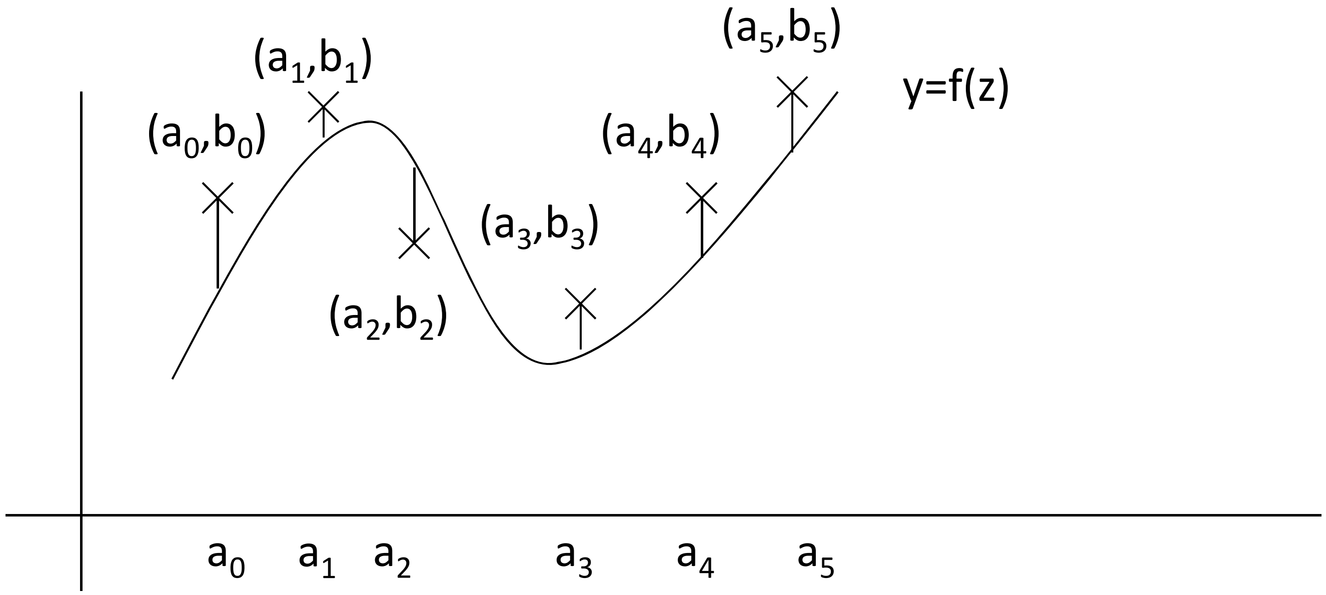
Capítulo 5.

Lecturas recomendadas:

“Matrix Computations”. G.Golub & C.Van Loan

Capítulo 5. Punto 5.3

Aplicaciones: Ajuste de curvas



$$f(z) = x_0 + x_1 z + x_2 z^2 + x_3 z^3$$

Calcular los coeficientes del polinomio en z para que con m=5, sea mínimo

$$\sum_{i=0}^{m-1} (f(a_i) - b_i)^2$$

con $$f(a_i) - b_i = x_0 + x_1 a_i + x_2 a_i^2 + x_3 a_i^3 - b_i$$

Definamos las siguientes matrices y vectores:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & a_0 & a_0^{\;2} & a_0^{\;3} \\ 1 & a_1 & a_1^{\;2} & a_1^{\;3} \\ 1 & a_2 & a_2^{\;2} & a_2^{\;3} \\ 1 & a_3 & a_3^{\;2} & a_3^{\;3} \\ 1 & a_4 & a_4^{\;2} & a_4^{\;3} \end{bmatrix}; \; x = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}; \; b = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix};$$

Obsérvese que:

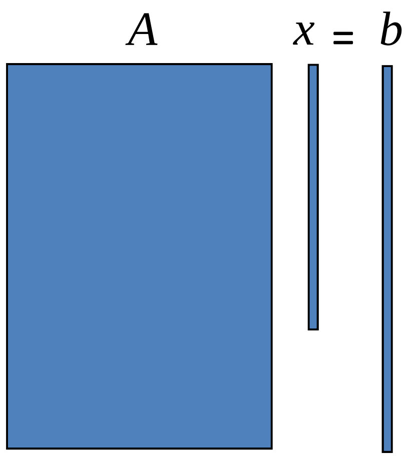
$$f(a_i) - b_i = x_0 + x_1 a_i + x_2 a_i^{\;2} + x_3 a_i^{\;3} - b_i = (Ax - b)_i = A_{(i)} x - b_i$$

Por tanto:

$$\sum_{i=0}^{m-1} (f(a_i) - b_i)^2 = \|Ax - b\|_2^{\;2}$$

$$\min_x \sum_{i=0}^{m-1} (f(a_i) - b_i)^2 = \min_x \|Ax - b\|_2^{\;2}$$

En forma matricial



con $A \in \Re^{m \times n}, x \in \Re^{n}, b \in \Re^{m}$

y $\quad a_{\text{ij}} = a_i^{\,j},\; x = \begin{bmatrix} x_0 & x_1 & \dots & x_{n-1} \end{bmatrix}^T \in \Re^n, b = \begin{bmatrix} b_0 & b_1 & \dots & b_{m-1} \end{bmatrix}^T \in \Re^m$

$$\left\| Ax - b \right\|_2 = \sqrt{(Ax-b)_0^{\;2} + (Ax-b)_1^{\;2} + \ldots + (Ax-b)_{m-1}^{\;2}}$$

El ajuste de la curva por mínimos cuadrados es equivalente a la resolución de un sistema de ecuaciones sobredeterminado:

$$\text{Resolver } Ax_{LS} = b \Leftrightarrow \boxed{\text{Encontrar } x_{LS} \in \Re^n \text{ tal que } \left\| Ax_{LS} - b \right\|_2 = \min_{x \in \Re^n} \left\| Ax - b \right\|_2}$$

Problema Lineal de Mínimos Cuadrados

El Problema Lineal de Mínimos Cuadrados (PLMC)

Dada la matriz $A \in \Re^{mxn}, m \geq n,$ de rango completo,

y un vector $b \in \Re^{m}$ encontrar un $x_{LS} \in \Re^{n}$ tal que

$$\left\| Ax_{LS} - b \right\|_2 = \min_{x \in \Re^n} \left\| Ax - b \right\|_2$$

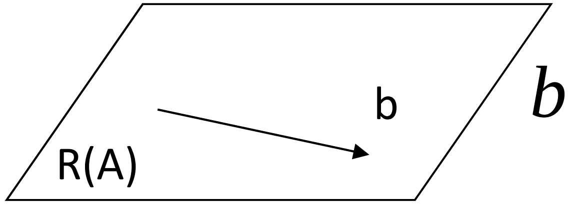
Resolución del PLMC mediante las Ecuaciones normales

$$\min_{x\in\Re^n}\left\|Ax-b\right\|_2 \geq 0$$

Si imponemos el valor más pequeño de los posibles

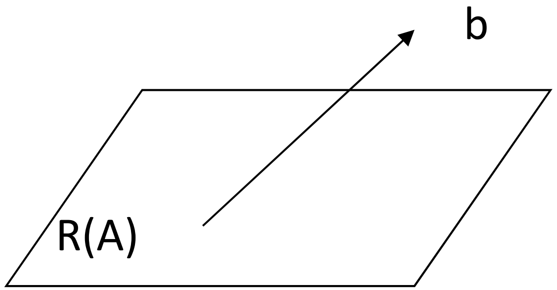
$$\left\|Ax-b\right\|_2 = 0 \Rightarrow Ax=b \Rightarrow b \text{ es una C.L. de las columnas de } A$$

Posibilidades:



$$b \in R(A) \qquad \left\|Ax-b\right\|_2 = 0$$

Solución exacta

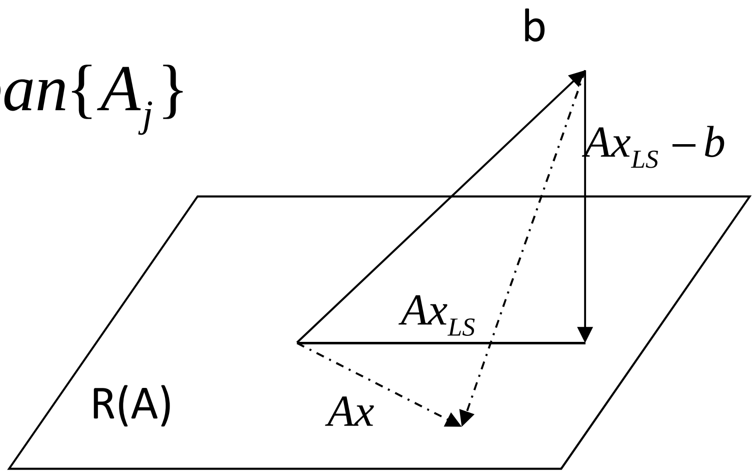


$$b \notin R(A) \qquad \left\|Ax-b\right\|_2 > 0$$

Solución de mínimos cuadrados

Resolución del PLMC mediante las Ecuaciones Normales

$$R(A) = span\{A_j\}$$



Solución de mínimos cuadrados: $$(Ax_{LS} - b) \perp R(A)$$

Para $j = 1,2,\ldots,n$

$$A_j^T (Ax_{LS} - b) = 0$$

En forma matricial:

$$A^T (Ax_{LS} - b) = 0 \Leftrightarrow A^T A x_{LS} = A^T b$$

Ecuaciones normales del PLMC: $A^T A x_{LS} = A^T b$

Resolución del PLMC mediante las Ecuaciones Normales

Problema con las Ecuaciones normales del PLMC

$$A^T(Ax_{LS}-b)=0 \Leftrightarrow A^TAx_{LS}=A^Tb$$

Sea $A=\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \mu & 0 \\ 0 & \mu \end{bmatrix}$, tal que $fl(1+\mu^2)=1$

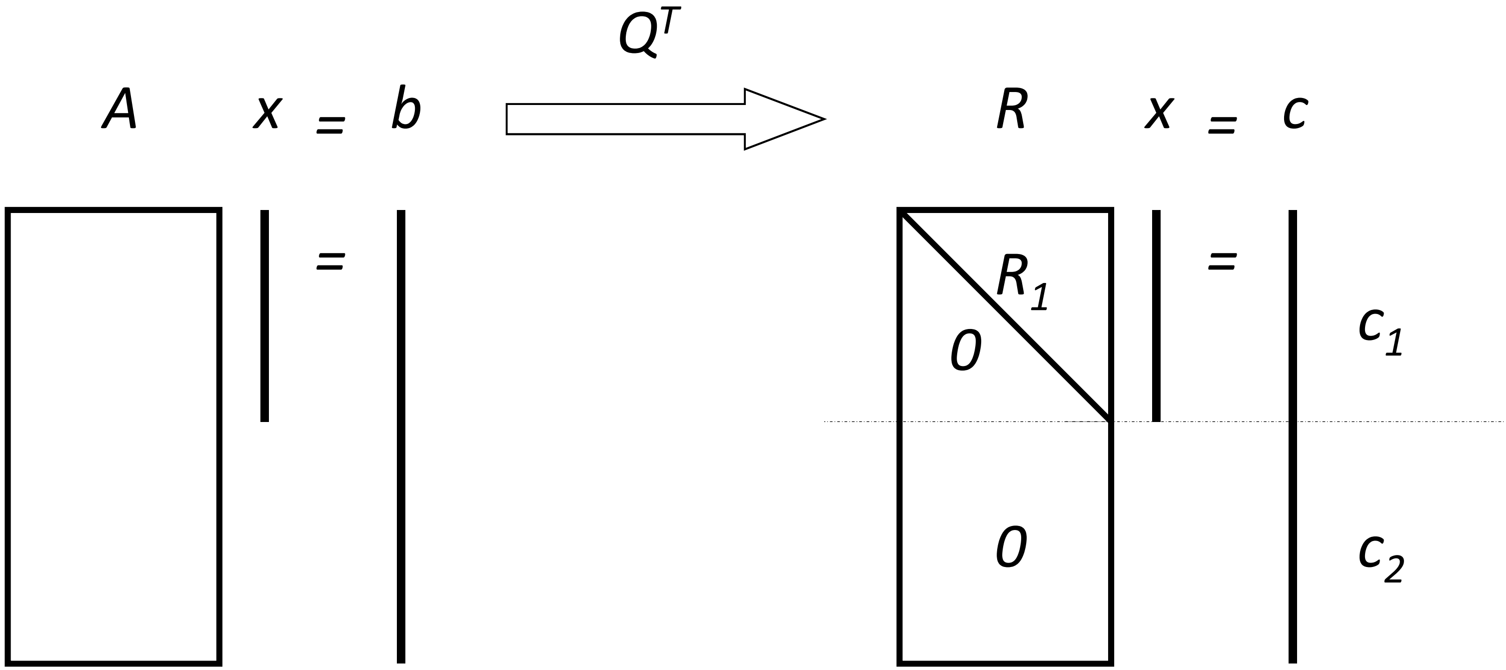
Entonces

$$fl(A^TA)=fl\left(\begin{bmatrix} 1 & \mu & 0 \\ 1 & 0 & \mu \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \mu & 0 \\ 0 & \mu \end{bmatrix}\right)=\begin{bmatrix} fl(1+\mu^2) & 1 \\ 1 & fl(1+\mu^2) \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

- Obsérvese que *rank(A)=2* mientras que *rank(fl(A^TA))=1*.
- *fl(A^TA)* no es invertible y el problema no se puede resolver aunque *A* es de rango completo
- Al hacer la operación *fl(A^TA)* se ha perdido información

Resolución del PLMC mediante la Descomposición QR

Si $A=QR$ con $Q^TQ=I$ y R triangular superior(Descomposición QR)



Transformaciones que hacen 0's

$$Mx = \begin{bmatrix} m & m & m & m \\ m & m & m & m \\ m & m & m & m \\ m & m & m & m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ x \\ x \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad Mx = \begin{bmatrix} m & m & m & m \\ m & m & m & m \\ m & m & m & m \\ m & m & m & m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ x \\ x \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ x \\ x \end{bmatrix};$$

Ejemplos: Matrices de Gauss, Matrices de Householder, Matrices de Givens

Transformaciones ortogonales

$$Q \in \Re^{nxn} (\mathrm{Q} \in C^{nxn}) \text{ tal que } Q^T Q = I (Q^H Q = I) \Leftrightarrow Q^T = Q^{-1} (Q^H = Q^{-1})$$

Ejemplos: Matrices de Householder, Matrices de Givens

Propiedad de las transformaciones ortogonales:

- **Conservan la 2-norma vectorial**

$$\|Qx\|_2 = \sqrt{(Qx)^T (Qx)} = \sqrt{x^T Q^T Q x} = \sqrt{x^T x} = \|x\|_2$$

Resolución del PLMC mediante la Descomposición QR

Sea la matriz $A \in \Re^{mxn}$, $m \geq n$, de rango completo, $Q \in \Re^{mxm}$, ortogonal, $R \in \Re^{mxn}$, triangular superior, con $R = \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}$, y supongamos que $A = QR$ (Descomposición QR de A)

$$\left\|Ax - b\right\|_2^2 = \left\|Q^T(Ax - b)\right\|_2^2 = \left\|Q^T Ax - Q^T b)\right\|_2^2 = \left\|Rx - Q^T b\right\|_2^2 =$$

$$= \left\|\begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix} x - Q^T b\right\|_2^2 = \left\|R_1 x - c_1\right\|_2^2 + \left\|-c_2\right\|_2^2, \text{ con } c = Q^T b = \begin{array}{c|l} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} n \\ m-n \end{array} \end{array}$$

$$\left\|Ax - b\right\|_2^2 = \left\|R_1 x - c_1\right\|_2^2 + \left\|-c_2\right\|_2^2, \text{ y } \left\|-c_2\right\|_2^2 \text{ no depende de } x$$

Por tanto, el valor mínimo de

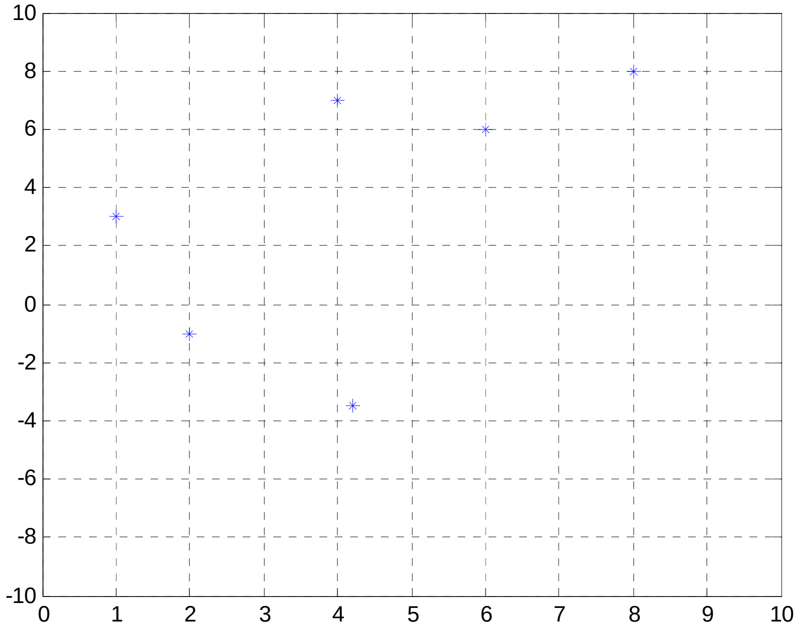
$$\left\|Ax - b\right\|_2^2 \text{ se alcanza cuando } \left\|R_1 x_{LS} - c_1\right\|_2^2 = 0 \Leftrightarrow x_{LS} = R_1^{-1} c_1$$

$$\text{y} \quad \min_{x \in \Re^n} \left\|Ax - b\right\|_2^2 = \left\|-c_2\right\|_2^2$$

Aplicaciones

Problemas de mínimos cuadrados; ajuste de funciones a un conjunto de puntos.

Sea el siguiente conjunto de puntos (aleatorios) en el plano: (1,3), (2, -1), (4,7), (4.2,-3.5), (6,6) (8,8)



Ejemplo

Queremos encontrar una función, de algún tipo predefinido, que pase lo mas cerca posible de esos puntos;Por ejemplo, un polinomio de grado 3:

$$ax^3+bx^2+cx+d$$

Para cada punto planteamos la igualdad “deseada”:

para (1,3):

$$a\cdot 1^3+b\cdot 1^2+c\cdot 1+d = 3$$

para (2,-1):

$$a\cdot 2^3+b\cdot 2^2+c\cdot 2+d = -1$$

para (4,7):

$$a\cdot 4^3+b\cdot 4^2+c\cdot 4+d = 7$$

Y así para todos los puntos

Aplicaciones

Versión matricial del sistema de ecuaciones:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 8 & 4 & 2 & 1 \\ 64 & 16 & 4 & 1 \\ 512 & 64 & 8 & 1 \\ 216 & 36 & 6 & 1 \\ 74{,}08 & 17{,}64 & 4{,}2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ 7 \\ 8 \\ 6 \\ -3{,}5 \end{pmatrix}$$

No existe solución para este sistema de ecuaciones (a no ser que la matriz sea singular)

En lugar de buscar "la" solución, buscamos la "mejor" solución posible, la que minimiza $||Ax-b||_2$. ➔ Solución en el sentido de "mínimos cuadrados".

Este problema se puede resolver con las "ecuaciones normales": $A^TAx=A^Tb$; numéricamente es mejor utilizar la descomposición QR.

Aplicaciones

Calculamos en Matlab la QR

```
>> [Q,R]=qr(A)

Q =

  -0.0018   -0.0620    0.5609    0.7647   -0.2769    0.1420
  -0.0142   -0.2094    0.6703   -0.2355    0.6068   -0.2880
  -0.1134   -0.5286    0.1279   -0.2898   -0.6458   -0.4363
  -0.9073    0.3573    0.1507   -0.1254   -0.0858    0.0575
  -0.3828   -0.4941   -0.4407    0.4623    0.3589   -0.2694
  -0.1313   -0.5487    0.0527   -0.2154    0.0427    0.7942


R =

 -564.3138  -76.0356  -10.5902   -1.5507
         0  -13.9558   -5.0058   -1.4855
         0         0    1.1961    1.1218
         0         0         0    0.3609
         0         0         0         0
         0         0         0         0
```

Aplicaciones

Se multiplica b por Q^T

```
>> b1=Q'*b
```

$= [-9.8805\ \ -1.8625\ \ 0.2852\ \ 3.0253\ \ -4.6408\ \ -6.2758]^T$

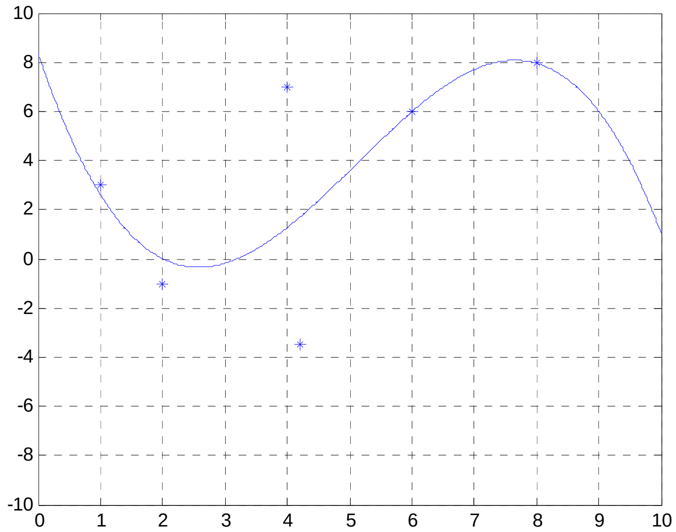
Y se resuelve el sistema triangular:

```
>> sol=R(1:4)\b1(1:4)

sol =

  -0.1287
   1.9760
  -7.6248
   8.3838
```

$$= \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}$$



Obtenemos la gráfica del polinomio

$$sol(1)\cdot x^3 + sol(2)\cdot x^2 + sol(3)\cdot x + sol(4)$$

Residuo= $\sqrt{(-4.6408)^2 + (-6.2758)^2} = 7.8053$

Tema 2.

La descomposición QR vía Reflexiones de Householder

Bibliografía para el Tema 2:

- *“Matrix Computations”. G.Golub & C.Van Loan*

Capítulo 5.

Lecturas recomendadas:

“Matrix Computations”. G.Golub & C.Van Loan

Capítulo 5. Punto 5.1, 5.2 y 5.4

Descomposición QR

Deseamos obtener una nueva descomposición de una matriz $A \in \Re^{mxn}$, en la forma:

A=QR

Q es una matriz ortogonal, y R es una matriz triangular superior

Puede utilizarse también para resolver sistemas de ecuaciones lineales generales

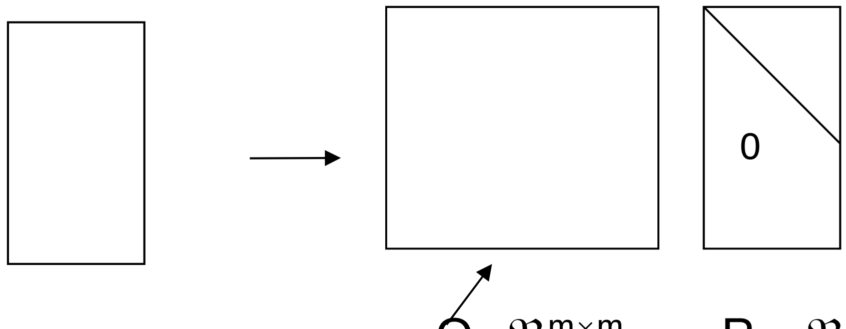
$$Ax = b \Leftrightarrow QRx = b \Leftrightarrow Rx = Q^T b$$

INTRODUCCIÓN

La descomposición QR se puede calcular independientemente de las dimensiones de A

$A \in \Re^{mxn}$,

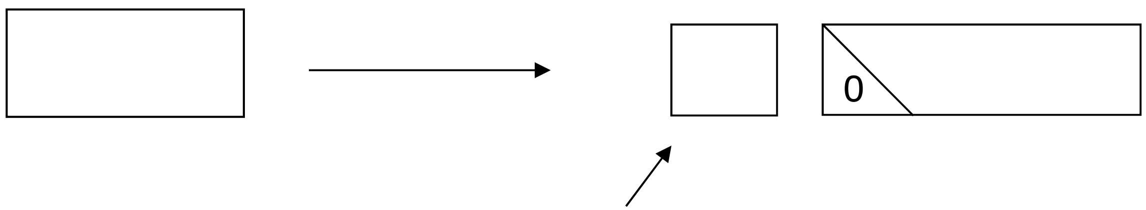
m>n



$Q \in \Re^{m \times m}$ $R \in \Re^{m \times n}$

$A \in \Re^{mxn}$,

m<n



$Q \in \Re^{m \times m}$ $R \in \Re^{m \times n}$

INTRODUCCIÓN

La descomposición QR se puede calcular de muchas formas:

1) Basada en Reflexiones de Householder

2) Basada en Rotaciones de Givens

3) Basada en la ortonormalización modificada de Gram- Schmidt

4) Basada en rotaciones “rápidas” de Givens

Reflexiones de Householder

Sea v en $\Re^n$ distinto de 0. Las Reflexiones de Householder son matrices en $\Re^{n\times n}$ de la forma:

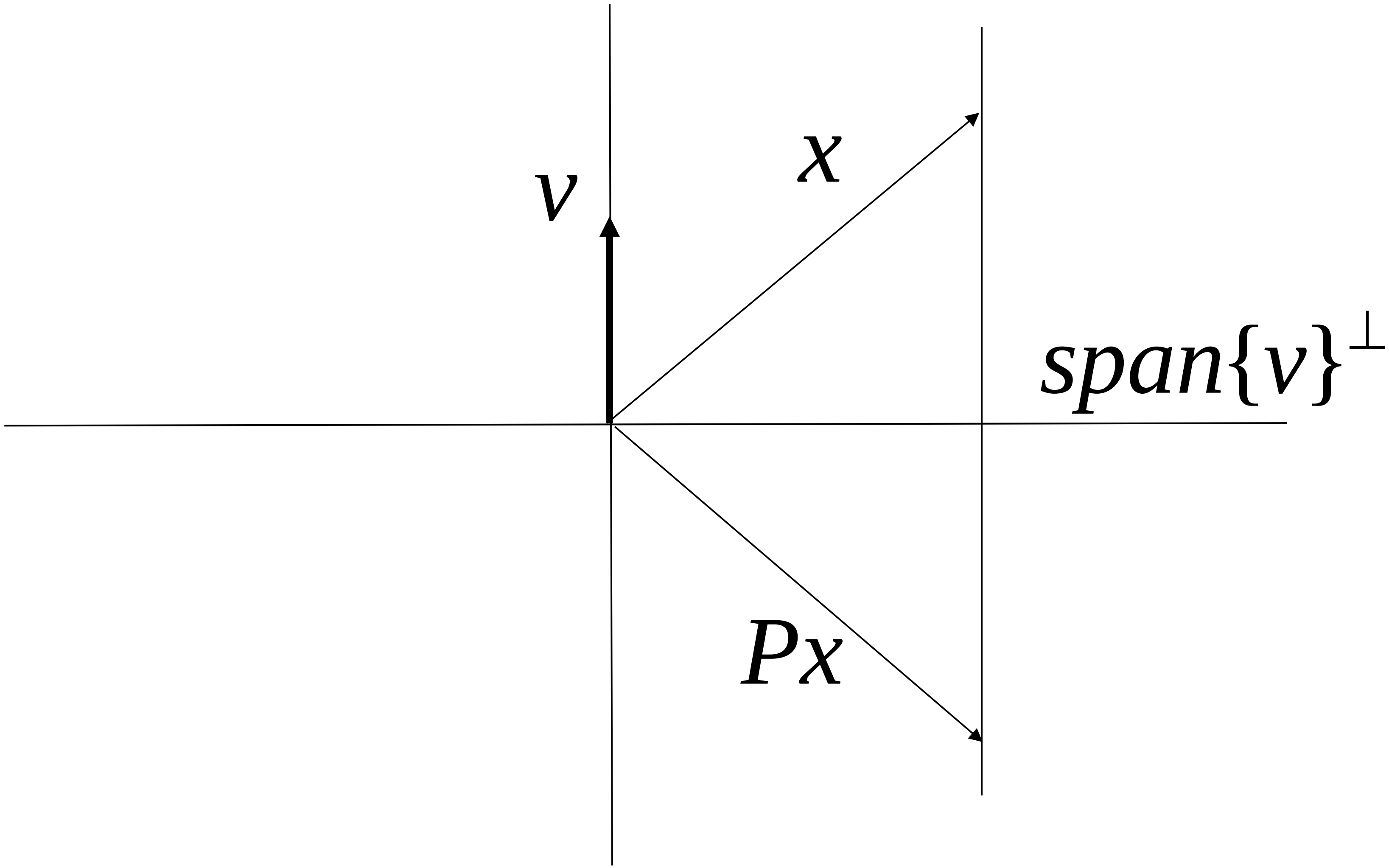
$$P = I - 2\frac{v \cdot v^T}{v^T \cdot v}$$

$v \cdot v^T \rightarrow$ Matriz de rango 1

$v^T \cdot v \rightarrow$ Escalar

1) Cada *P* es una Modificación de Rango 1 de la identidad, Simétrica, Involutiva y Ortogonal

2) Si $y=Px$, y se obtiene reflejando x sobre el subespacio $Rango\{v\}^{\perp}$.(Complemento ortogonal de rango de *v*)



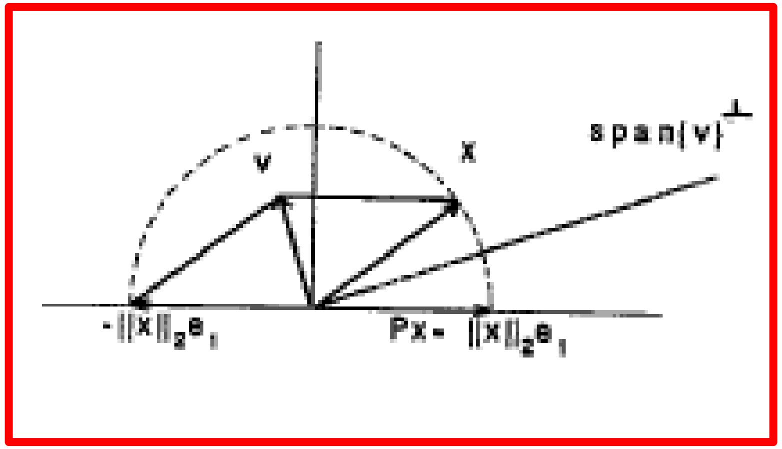
v
x
$span\{v\}^{\perp}$
Px

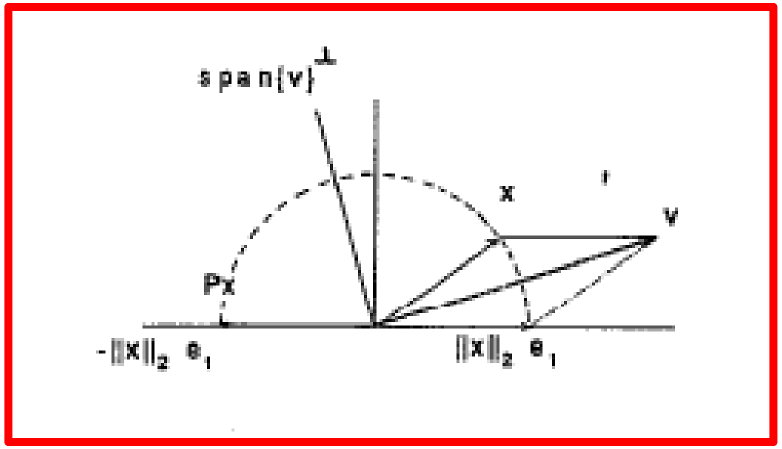
Reflexiones de Householder

Utilización para hacer 0s en ciertas componentes de un vector:

Sea $x \in \Re^n$, queremos construir una matriz de Householder P tal que $Px=\alpha \cdot e_1$ (Todas las componentes de Px son 0 excepto la primera).

Escogemos el vector v como: $v=x \pm ||x||_2 e_1$. Es fácil comprobar que, construyendo P con este vector v, Px tiene todas sus componentes iguales a 0, excepto la primera.





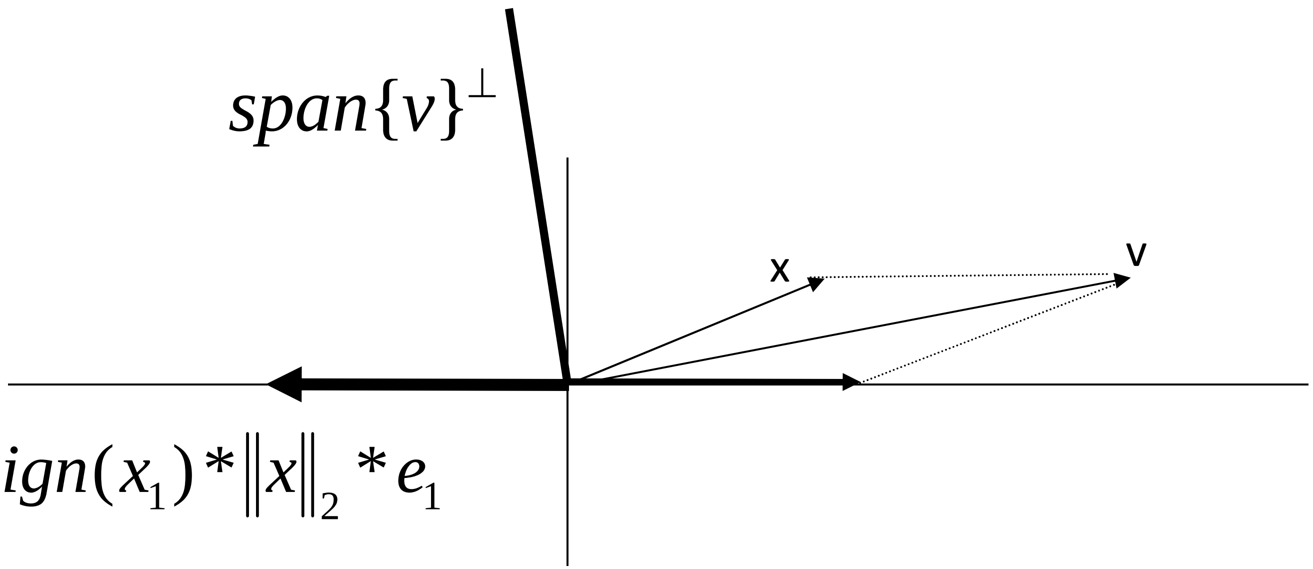
Matrices (reflexiones) de Householder

$$P = I - \frac{2vv^T}{v^T v}, v \neq 0$$

Propiedades:

•Permiten hacer ceros en las componentes de un vector $x \in \Re^n$

$$Si \ x \in \Re^n, x \neq e_1 \text{ y } v = x + sign(x_1) * \|x\|_2 * e_1$$



$$Px = -sign(x_1) * \|x\|_2 * e_1$$

Permiten hacer ceros en las componentes de un vector

$$Si\ x \in \Re^n, x \neq e_1 \text{ y } v = x + sign(x_1) * \|x\|_2 * e_1$$

entonces

$$Px = x - \frac{2vv^T x}{v^T v} = x - \frac{(v^T x)}{(\frac{v^T v}{2})} v = x - v = x - (x + sign(x_1) * \|x\|_2 * e_1) = -sign(x_1) * \|x\|_2 * e_1$$

ya que

$$(v^T x) = (x + sign(x_1) * \|x\|_2 * e_1)^T x = \|x\|_2 (\|x\|_2 + sign(x_1) * x_1)$$

$$(\frac{v^T v}{2}) = \frac{(x + sign(x_1) * \|x\|_2 * e_1)^T (x + sign(x_1) * \|x\|_2 * e_1)}{2} =$$

$$= \frac{\|x\|_2{}^2 + 2sign(x_1) * \|x\|_2 * x_1 + \|x\|_2{}^2}{2} = \|x\|_2 (\|x\|_2 + sign(x_1) * x_1)$$

Reflexiones de Householder
Detalles de implementación.

- Sólo hay que calcular el vector **v** y el factor $\beta=(v^t v)/2$; en aplicaciones prácticas, NUNCA se calcula ni almacenaa la matriz P.
- El vector **v** se puede normalizar para que v(1)=1; de esa forma, se puede almacenar la parte importante del vector v (v(2:n)) en la parte de x donde se han hecho los ceros (x(2:n)). En este caso

$$P = I - \tau * \overline{u} * \overline{u}^T, \quad \text{con } u = v/\|v\|_2, \quad \overline{u} = u/u_1, \ \overline{u}_1 = 1, \ \tau = 2 * u_1^{\,2}$$

Reflexiones de Householder

Ejemplo:

$$x = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{Tomamos} \qquad v = x + \|x\|_2 e_1 \longrightarrow v = \begin{pmatrix} 9 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$P = I - 2\frac{v \cdot v^t}{v^t \cdot v} = \frac{1}{54}\begin{bmatrix} -27 & -9 & -45 & -9 \\ -9 & 53 & -5 & -1 \\ -45 & -5 & 29 & -5 \\ -9 & -1 & -5 & 53 \end{bmatrix} \longrightarrow Px = \begin{pmatrix} -6 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ejemplo:

$$x = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix}; \Rightarrow v = x + sign(x_1) * \|x\|_2 * e_1; \Rightarrow v = \begin{bmatrix} 6.5826 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix};$$

$$P = I - \frac{2vv^T}{v^T v}, v \neq 0$$

$$P = \begin{bmatrix} -0.4364 & -0.8729 & -0.2182 \\ -0.8729 & 0.4696 & -0.1326 \\ -0.2182 & -0.1326 & 0.9668 \end{bmatrix}$$

$$y = Px = \begin{bmatrix} -4.5826 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$norm(y) = norm(x) = 4.5826$$

Descomposición QR basada en Householder(1)

Partimos de una matriz ejemplo 6*5

$$A = \begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x \end{pmatrix} \longrightarrow H_1 \cdot A = \begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \end{pmatrix}$$

Mediante una reflexión, hacemos ceros en la primera columna

Descomposición QR basada en Householder(2)

Luego repetimos el mismo proceso, con cada columna para hacerla triangular superior:

$$H_1 \cdot A = \begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \end{pmatrix} \longrightarrow H_2 \cdot H_1 \cdot A = \begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \end{pmatrix} \longrightarrow \bullet\bullet\bullet$$

$$\longrightarrow H_5 \cdot H_4 \cdot H_3 \cdot H_2 \cdot H_1 \cdot A = \begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Descomposición QR basada en Householder(3)

$$\mathrm{H}_5 \cdot \mathrm{H}_4 \cdot \mathrm{H}_3 \cdot \mathrm{H}_2 \cdot \mathrm{H}_1 \cdot \mathrm{A} = \begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow H_5 \cdot H_4 \cdot H_3 \cdot H_2 \cdot H_1 = Q^T$$

H_i ortogonales => Q ortogonal

$$Q^T A = R \longrightarrow A = QR$$

Q ortogonal

Algoritmo de triangularización de Householder

Para $j = 1, 2, \ldots, n$

Calcula la Matriz de Householder, H_j, que hace ceros en la columna j

Para $k = j, j+1, \ldots, n$

Modifica la columna k: $A_k \leftarrow H_j * A_k$

$$\begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & & j & & & \end{array} \\ \begin{bmatrix} x & x & x & x & x & x \\ & x & x & x & x & x \\ & & x & x & x & x \\ & & x & \mathrm{x} & \mathrm{x} & \mathrm{x} \\ & & x & \mathrm{x} & \mathrm{x} & \mathrm{x} \\ & & x & \mathrm{x} & \mathrm{x} & \mathrm{x} \end{bmatrix} \\ \begin{array}{cccccc} & & k & k & k & k \end{array} \end{array}$$

$$\text{Coste}: \quad 2n^2\left(m - \frac{n}{3}\right) \; Flops$$

Construcción del algoritmo

$v = x + sg(x_1)\ ||x||_2 e_1$

$$\begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & \boxed{x} & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \end{pmatrix}$$

<u>Procedimiento Norm(j)</u>

$$\rho_j = \mathrm{sgn}(a_{jj})\left(\sum_{i=j}^{m} a_{ij}^2\right)^{1/2}$$

$$v_j = [0, 0, \ldots, 0, a_{jj} + \rho_j, a_{j+1,j}, \ldots, a_{m,j}]^T$$

$$\beta_j = \rho_j(\rho_j + a_{jj})$$

Coste: 2(m-j) Flops

Resultado de aplicar una Matriz de Householder, P, a otro vector y distinto del x que ha servido para calcularla

$$Py = y - \gamma v \qquad\qquad \gamma = (1/\beta)(v^T y) \ \text{ y } \ \beta = (v^T v)/2$$

<u>Procedimiento Fact(j,k)</u>

$$\gamma_{jk} = (1/\beta_j)\sum_{i=j}^{m}(v_j)_i a_{ik}$$

Coste: 2(m-j) Flops

<u>Procedimiento Cmod(j,k)</u>

$$Para\ i = j, j+1, \ldots, m$$

$$a_{ik} = a_{ik} - \gamma_{jk}(v_j)_i$$

Coste: 2(m-j) Flops

$$\begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x \end{pmatrix}$$

Algoritmo de Triangularización **Ortogonal** (Householder)

Para $j = 1, 2, \ldots, n$

$norm(j)$

Para $k = j, j+1, \ldots n$

$fact(j,k)$

$c\mathrm{mod}(j,k)$

finpara

finpara

Coste: $2n^2\left(m - \frac{n}{3}\right)$ flops

Algoritmo de Resolución del Problema Lineal de Mínimos Cuadrados via Householder:

Entrada: $A \in R^{m\times n}, b \in R^{m}$

Salida: $x \in R^{n}$,tal que $x = \arg \min_{x\in R^n} \|Ax - b\|$

$\overline{A} = [A\ b]$

Para $j = 1, 2, \ldots, n$

$\quad norm(j)$

$\quad$ Para $k = j, j+1, \ldots n+1$

$\quad\quad fact(j,k)$

$\quad\quad c\text{mod}(j,k)$

$\quad$ finpara

finpara

Resolver el sistema triangular superior

$c=\overline{A}_{n+1}$. % asigna columna ;

$x_n=c_n / \overline{A}_{nn}$

Para j=n-1 hasta 1

$\quad x_j = c_j$

$\quad$ Para i=j+1 hasta n

$\quad\quad x_j = x_j - \overline{A}_{ji} * x_i$;

$\quad$ Finpara

$\quad x_j = x_j / \overline{A}_{jj}$;

Finpara.

Ejemplo Calcular x_{LS} tal que $\left\| Ax_{LS} - b \right\|_2 = \min_{x \in \Re^n} \left\| Ax - b \right\|_2$

$$A=\begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 4 & 5 & 6 \\ 1 & 8 & 1 \\ 5 & 9 & 5 \end{bmatrix} \quad b=\begin{bmatrix} 6 \\ 3 \\ 2 \\ 5 \end{bmatrix} \longrightarrow A=\begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 & 6 \\ 4 & 5 & 6 & 3 \\ 1 & 8 & 1 & 2 \\ 5 & 9 & 5 & 5 \end{bmatrix}$$

Calcular H_1 (*norm(1)*): ro=7,1414 v=$[10.1414\ \ 4\ \ 1\ \ 5]^T$ beta=72.4243

Calcula $A \leftarrow H_1 A$

fact(1,1) → gamma1=1 fact(1,2) → gamma2 =1.1480

fact(1,3) → gamma3=0.9704 fact(1,4) → gamma4=1,3787

Cmod(1,1)→	Cmod(1,2)→	Cmod(1,3)→	Cmod(1,4)→
-7.1414	-10.6421	-7.8416	-7.9816
0	0.4081	2.1183	-2.5146
0	6.8520	0.0296	0.6213
0	3.2601	0.1478	-1.8933

Ejemplo

Calcular H_2 (*norm(2)*): ro=7.5990 v=[0 8.0071 6.8520 3.2601]^T beta=60.8462

Calcula $A \leftarrow H_2A$

Fact(2,2) $\rightarrow$gamma2=1 fact(2,3) $\rightarrow$gamma3 =0.2900 Fact(2,4) $\rightarrow$gamma4=-0.3624

	Cmod(2,2)$\rightarrow$	Cmod(2,3)$\rightarrow$	Cmod(2,4)$\rightarrow$
-7.1414	-10.6421	-7.8416	-7.9816
0	-7.5990	-0.2038	0.3870
0	0	-1.9576	3.1044
0	0	-0.7976	-0.7119

Calcular H_3 (*norm(3)*): ro=-2.1138 v=[0 0 -4.0714 -0.7876]^T beta=8.6062

Calcula $A \leftarrow H_3A$

fact(3,3) $\rightarrow$gamma3 =1 Fact(3,4) $\rightarrow$gamma4=-1.4027

	Cmod(2,2)$\rightarrow$	Cmod(2,3)$\rightarrow$	Cmod(2,4)$\rightarrow$
-7.1414	-10.6421	-7.8416	-7.9816
0	-7.5990	-0.2038	0.3870
0	0	2.1138	-2.6063
0	0	0	-1.8307

Ejemplo

Resolución del Sistema Triangular

$$\begin{bmatrix} -7.1414 & -10.6421 & -7.8416 \\ 0 & -7.5990 & -0.2038 \\ 0 & 0 & 2.1138 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -7.9816 \\ 0.3870 \\ -2.6063 \end{bmatrix}$$

Solución: $x_{LS} = \begin{bmatrix} 2.4981 \\ -0.0179 \\ -1.2330 \end{bmatrix}$ Residuo:1.8307

Desc. QR y PLMC en Librerías

En Matlab:

Desc. QR: R=qr(A) Sobreimprime en la parte triangular superior de A la R

[Q,R]=qr(A) Devuelve la Q y la R

PLMC: x_{LS}=A\b Devuelve la solución del PLMC *min*||*Ax*-*b*||

En LAPACK:

PLMC:

SUBROUTINE DGELSD(M, N, NRHS, A, LDA, B, LDB, S, RCOND, RANK,WORK, LWORK, IWORK, INFO)

Desc. QR:

SUBROUTINE DGEQRF(M, N, A, LDA, TAU, WORK, LWORK, INFO)

SUBROUTINE DORGQR(M, N, K, A, LDA, TAU, WORK, LWORK, INFO)

Ejercicios propuestos

1. Escribe un algoritmo en Matlab que resuelva el problema lineal de mínimos cuadrados usando las ecuaciones normales
2. Escribe un algoritmo en Matlab que triangularice una matriz de tamaño mxn, usando la triangularización ortogonal de Householder.
3. Escribe un algoritmo en Matlab que resuelva el problema lineal de mínimos cuadrados usando la descomposición QR mediante matrices de Householder

Tema 2.

La descomposición QR vía Rotaciones de Givens

Bibliografía para el Tema 2:

- *“Matrix Computations”. G.Golub & C.Van Loan*

Capítulo 5.

Lecturas recomendadas:

“Matrix Computations”. G.Golub & C.Van Loan

Capítulo 5. Punto 5.1, 5.2 y 5.4

INTRODUCCIÓN

La descomposición QR se puede calcular de muchas formas:

1) Basada en Reflexiones de Householder

2) Basada en Rotaciones de Givens

3) Basada en la ortonormalización modificada de Gram- Schmidt

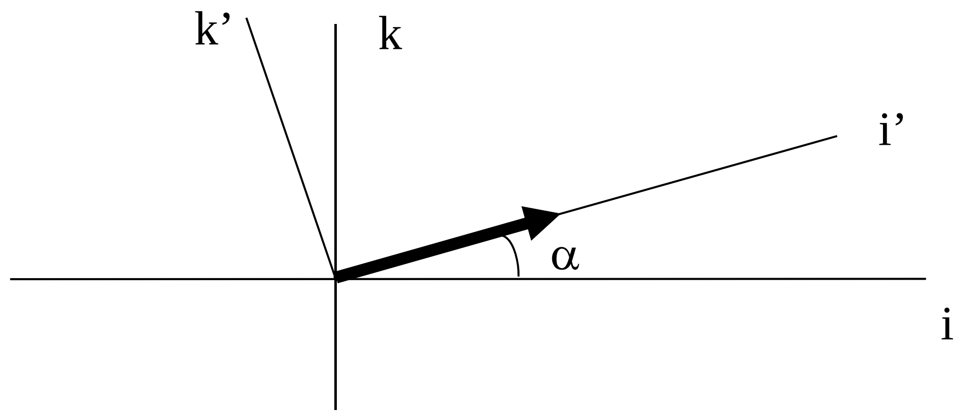
4) Basada en rotaciones “rápidas” de Givens

Rotaciones de Givens

$$G_{ik} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & s & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -s & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}; \qquad G_{ik} = \begin{cases} G(i,i) = G(k,k) = c = \cos\alpha \\ G(i,k) -= G(k,\mathrm{i}) = s = \sin\alpha \\ G(r,t) = 1, \ \mathrm{i} \neq r = t \neq k \\ G(r,t) = 0, \ r\text{esto de casos} \end{cases}$$

Propiedades:

- Ortogonales
- Permiten hacer ceros en una componente de un vector



Rotaciones de Givens

Caso 2x2

$$x=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}; \quad G=\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}; \quad c=\frac{x_1}{\sqrt{{x_1}^2+{x_2}^2}}; s=\frac{x_2}{\sqrt{{x_1}^2+{x_2}^2}}$$

$$Gx=\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} cx_1+sx_2 \\ -sx_1+cx_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \sqrt{x_1^2+x_2^2} \\ 0 \end{bmatrix};$$

Caso nxn

$$x=\begin{bmatrix} x_1 \\ . \\ x_i \\ . \\ x_k \\ . \\ . \\ x_n \end{bmatrix}; \quad G=\begin{bmatrix} 1 & 0. & . & . & & . & 0 & 0 \\ . & . & & & & & . & . \\ 0 & & c & & s & & . & 0 \\ 0 & & & 1 & & & & \\ 0 & & -s & & c & & & \\ . & & & & & . & . & . \\ . & & & & & & 1 & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . & . & 0 & 1 \end{bmatrix}; \quad c=\frac{x_i}{\sqrt{{x_i}^2+{x_k}^2}}; s=\frac{x_k}{\sqrt{{x_i}^2+{x_k}^2}}$$

$$Gx=\begin{bmatrix} 1 & 0 & . & . & & . & 0 & 0 \\ . & . & & & & & . & . \\ 0 & & c & & s & & . & 0 \\ 0 & & & 1 & & & & \\ 0 & & -s & & c & & & \\ . & & & & & . & . & . \\ . & & & & & & 1 & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . & . & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ . \\ x_i \\ . \\ x_k \\ . \\ . \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} x_1 \\ . \\ \sqrt{{x_i}^2+{x_k}^2} \\ . \\ 0 \\ . \\ . \\ x_n \end{bmatrix}$$

Ejemplos

$$x = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 6 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix};$$

$$\mathrm{t} = \frac{7}{2} = 3.5;\ c = 1/\sqrt{1+t^2} = 0.2747;$$

$$s = c * t = 0.9615$$

$$G = \begin{bmatrix} 0.2747 & 0 & 0 & 0.9615 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -0.9647 & 0 & 0 & 0.2747 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$y = Gx = \begin{bmatrix} 0.2747 & 0 & 0 & 0.9615 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -0.9647 & 0 & 0 & 0.2747 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 6 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.2801 \\ 3 \\ 6 \\ 0 \\ 9 \end{bmatrix}$$

$$x = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 6 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix};$$

$$\mathrm{t} = \frac{6}{3} = 2;\ c = 1/\sqrt{1+t^2} = 0.4472;$$

$$s = c * t = 0.8944$$

$$G_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.4472 & 0.8944 & 0 & 0 \\ 0 & -0.8944 & 0.4472 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$y = G_2 x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.4472 & 0.8944 & 0 & 0 \\ 0 & -0.8944 & 0.4472 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 6 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 6.7082 \\ 0 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix}$$

Descomposición QR vía Rotaciones de Givens

$$A=\begin{bmatrix} a & a & a & a\\ a & a & a & a\\ a & a & a & a\\ a & a & a & a\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix} a & a & a & a\\ a & a & a & a\\ b & b & b & b\\ 0 & b & b & b\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix} a & a & a & a\\ b & b & b & b\\ 0 & b & b & b\\ 0 & b & b & b\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix} b & b & b & b\\ 0 & b & b & b\\ 0 & b & b & b\\ 0 & b & b & b\end{bmatrix}$$

Coste: $2n^3$ Flops

$$G_{1,1}\ldots * G_{n-2,1} * G_{n-1,1} * A = R_1$$

$$R_1=\begin{bmatrix} b & b & b & b\\ 0 & b & b & b\\ 0 & b & b & b\\ 0 & b & b & b\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix} b & b & b & b\\ 0 & b & b & b\\ 0 & c & c & c\\ 0 & 0 & c & c\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix} b & b & b & b\\ 0 & c & c & c\\ 0 & 0 & c & c\\ 0 & 0 & c & c\end{bmatrix}$$

$$G_{2,2}\ldots * G_{n-2,2} * G_{n-1,2} * R_1 = R_2$$

$$R_2=\begin{bmatrix} b & b & b & b\\ 0 & c & c & c\\ 0 & 0 & c & c\\ 0 & 0 & c & c\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix} b & b & b & b\\ 0 & c & c & c\\ 0 & 0 & d & d\\ 0 & 0 & 0 & d\end{bmatrix}=R$$

$$G_{n-1,n-1} * R_{1,n-1} = R$$

$$G_{n-1,n-1} * \ldots * G_{2,2}\ldots * G_{n-2,2} * G_{n-1,2} * G_{1,1}\ldots * G_{n-2,1} * G_{n-1,1} * A = R$$

$$A = Q * R \text{ con } \mathrm{Q}^{\mathrm{T}} = G_{n-1,n-1} * \ldots * G_{2,2}\ldots * G_{n-2,2} * G_{n-1,2} * G_{1,1}\ldots * G_{n-2,1} * G_{n-1,1}$$

Algoritmo: triangularización de Givens

Para $j = 1, 2, \ldots, n$

Para $i = m, m-1, \ldots, j+1$

Calcular c y s tales que $\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i-1,j} \\ a_{i,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{a_{i-1,j}^2 + a_{i,j}^2} \\ 0 \end{bmatrix}$

Si $|a_{i,j}| < |a_{i-1,j}|$

$t = a_{i,j} / a_{i-1,j}; c = 1/\sqrt{1+t^2}; s = c * t;$

Si no

$t = a_{i-1,j} / a_{i,j}; s = 1/\sqrt{1+t^2}; c = s * t;$

Para $k = j, j+1, \ldots, n$

$u = a_{i-1,k}; w = a_{i,k};$

$$\begin{bmatrix} a_{i-1,k} \\ a_{i,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c * u + s * w \\ -s * u + c * w \end{bmatrix}$$

Finpara

Finpara

Finpara

Coste: $3n^2(m-n/3)$ *flops*

Algoritmo de Resolución del Problema Lineal de Mínimos Cuadrados via Rotaciones de Givens:

Entrada: $A \in R^{m\times n}, b \in R^m$

Salida: $x \in R^n$,tal que $x = \arg \min_{x\in R^n} \|Ax - b\|$

$\overline{A} = [A\ b]$

Para $j = 1, 2, \ldots, n$

Para $i = m, m-1, \ldots, j+1$

Calcular c y s tales que $\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{a}_{i-1,j} \\ \overline{a}_{i,j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\overline{a}_{i-1,j}^2 + \overline{a}_{i,j}^2} \\ 0 \end{bmatrix}$

Si $|\overline{a}_{i,j}| < |\overline{a}_{i-1,j}|$

$t = \overline{a}_{i,j} / \overline{a}_{i-1,j}; c = 1/\sqrt{1+t^2}; s = c*t;$

Si no

$t = \overline{a}_{i-1,j} / \overline{a}_{i,j}; s = 1/\sqrt{1+t^2}; c = s*t;$

Para $k = j, j+1, \ldots, n, n+1$

$u = \overline{a}_{i-1,k}; w = \overline{a}_{i,k};$

$\begin{bmatrix} \overline{a}_{i-1,k} \\ \overline{a}_{i,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c*u + s*w \\ -s*u + c*w \end{bmatrix}$

Finpara

Finpara

Finpara

Resolver el sistema de ecuaciones triangular superior

$c = \overline{A}_{n+1}$

Para $j = n, n-1, \ldots, 1$

$x_j = c_j / \overline{a}_{jj}$

Para $i = 1, 2, \ldots, j-1$

$c_i = c_i - \overline{a}_{ij} x_j$

finpara

finpara

Ejemplo Calcular x_{LS} tal que $\left\|Ax_{LS}-b\right\|_2 = \min_{x\in\Re^n}\left\|Ax-b\right\|_2$

$$A=\begin{bmatrix}3&1&2\\4&5&6\\1&8&1\\5&9&5\end{bmatrix} \quad b=\begin{bmatrix}6\\3\\2\\5\end{bmatrix} \longrightarrow A=\begin{bmatrix}3&1&2&6\\4&5&6&3\\1&8&1&2\\5&9&5&5\end{bmatrix}$$

1

Calcular G_{34}

[c s]=[0.1961 0.9806]

Calcula $A \leftarrow G_{34}A$

A =

3.0000	1.0000	2.0000	6.0000
4.0000	5.0000	6.0000	3.0000
5.0990	10.3942	5.0990	5.2951
0.	-6.0796	0.0000	-0.9806

2

Calcular G_{23}

[c s]= [0.6172 0.7868]

Calcula $A \leftarrow G_{23}A$

A =

3.0000	1.0000	2.0000	6.0000
6.4807	11.2641	7.7152	6.0178
0	2.4814	-1.5736	0.9078
0	-6.0796	0.0000	-0.9806

Calcular G_{12}

[c s]=[0.4201   0.9075]

Calcula $A \leftarrow G_{12}A$

A =

7.1414	10.6421	7.8416	7.9816
0	3.8244	1.4260	-2.9169
0	2.4814	-1.5736	0.9078
0	-6.0796	0.0000	-0.9806

3

Calcular G_{34}

[c s]=[-0.3779   0.9258]

Calcula $A \leftarrow G_{34}A$

A =

7.1414	10.6421	7.8416	7.9816
0	3.8244	1.4260	-2.9169
0	-6.5665	0.5946	-1.2509
0	0	1.4569	-0.4700

4

Calcular G_{23}

[c s]=[-0.5033   0.8641]

Calcula $A \leftarrow G_{23}A$

A =

7.1414	10.6421	7.8416	7.9816
0	-7.5990	-0.2038	0.3870
0	0	-1.5316	3.1501
0	0	1.4569	-0.4700

5

Calcular G_{34}

[c s]=[0.7245   -0.6892]

Calcula $A \leftarrow G_{34}A$

A =

7.1414	10.6421	7.8416	7.9816
0	-7.5990	-0.2038	0.3870
0	0	-2.1138	2.6063
0	0	0	1.8307

6

Ejemplo

Resolución del Sistema Triangular

$$\begin{bmatrix} -7.1414 & -10.6421 & -7.8416 \\ 0 & -7.5990 & -0.2038 \\ 0 & 0 & 2.1138 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -7.9816 \\ 0.3870 \\ -2.6063 \end{bmatrix}$$

Solución: $x_{LS} = \begin{bmatrix} 2.4981 \\ -0.0179 \\ -1.2330 \end{bmatrix}$ Residuo:1.8307

Triangularización de Householder

A =

-7.1414	-10.6421	-7.8416	-7.9816
0	-7.5990	-0.2038	0.3870
0	0	2.1138	-2.6063
0	0	0	-1.8307

Triangularización de Givens

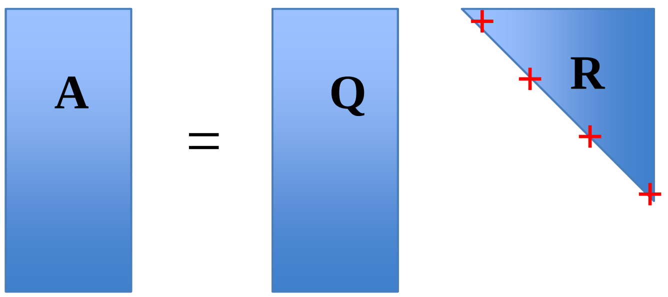
A =

7.1414	10.6421	7.8416	7.9816
0	-7.5990	-0.2038	0.3870
0	0	-2.1138	2.6063
0	0	0	1.8307

Proposición:

La Descomposición QR de una matriz A es esencialmente única

Dada $A \in \Re^{m\times n}$, $m \geq n$, $rank(A) = n$, existen matrices $Q \in \Re^{m\times n}$, con columnas ortonormales, y $R \in \Re^{n\times n}$, triangular superior, únicas, con $R_{11} > 0, , \ldots, R_{nn} > 0$, tales $A = QR$



$$Q_i^T Q_j = \delta_{ij}, i, j = 1, 2, \ldots, n$$

$$R_{ii} > 0, i = 1, 2, \ldots, n$$

Ejercicios propuestos

1. Escribe un algoritmo en Matlab que triangularice una matriz de tamaño mxn, usando la triangularización ortogonal de Givens.
2. Escribe un algoritmo en Matlab que resuelva el problema lineal de mínimos cuadrados usando la descomposición QR mediante rotaciones de Givens
3. Escribe un algoritmo en Matlab que triangularice una matriz tridiagonal de tamaño mxn, usando rotaciones de Givens y evalúa su coste en flops.