Fatoração QR

INF1608 – Análise Numérica

Waldemar Celes
celes@inf.puc-rio.br

Departamento de Informática, PUC-Rio

Método dos Mínimos Quadrados

Resolução via equações normais

$$A^T A\bar{\mathbf{x}} = A^T \mathbf{b}$$

- Pode resultar em matriz mal condicionada se grau for elevado

Método dos Mínimos Quadrados

Resolução via equações normais

$$A^T A\bar{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b}$$

- Pode resultar em matriz mal condicionada se grau for elevado

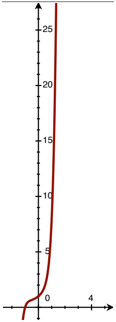
Exemplo:

- Seja:

$$x_0 = 2.0, x_1 = 2.2, x_2 = 2.4, ..., x_{10} = 4.0$$
$$y_i = 1 + x_i + x_i^2 + x_i^3 + x_i^4 + x_i^5 + x_i^6 + x_i^7$$

- Ajustar:

$$P(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + ... + c_7 x^7$$



Método dos Mínimos Quadrados

Exemplo (cont.):

- Equações normais: Matriz de Van der Monde

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^7 \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^7 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{10} & x_{10}^2 & \dots & x_{10}^7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{10} \end{bmatrix}$$

  - Matriz mal condicionada: $cond(A^T A) = 1.4359 \times 10^{19}$

Método dos Mínimos Quadrados

Exemplo (cont.):

- Equações normais: Matriz de Van der Monde

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^7 \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^7 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{10} & x_{10}^2 & \dots & x_{10}^7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{10} \end{bmatrix}$$

  - Matriz mal condicionada: $cond(A^T A) = 1.4359 \times 10^{19}$
- Solução numérica usando *double*: $\{1.5134, -0.2644, 2.3211, 0.2408, 1.2592, 0.9474, 1.0059, 0.9997\}$
- Solução analítica: $\mathbf{c_i} = \mathbf{1} \ \forall \ \mathbf{i}$

Método dos Mínimos Quadrados

Equações normais: Matriz de Van der Monde

- Nossa solução com Eliminação de Gauss com Pivotamento

```
Solucao de Van der Monde:
c[0] = -0.363224
c[1] = 4.3722
c[2] = -2.53903
c[3] = 3.04285
c[4] = 0.299416
c[5] = 1.14277
c[6] = 0.983988
c[7] = 1.00076
Residuo:
r[0] = -1.63246e-06
r[1] = 7.71636e-06
r[2] = -1.1324e-05
r[3] = 8.16633e-07
r[4] = 9.6772e-06
r[5] = -6.77464e-08
r[6] = -9.71002e-06
r[7] = -6.79087e-07
```

Ortogonalização

Sistemas inconsistentes

$$A_{m\times n}\mathbf{x}_n = \mathbf{b}_m, \quad m > n$$

Ortogonalização

Sistemas inconsistentes

$$A_{m\times n}\mathbf{x}_n = \mathbf{b}_m, \quad m > n$$

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \mathbf{v}_0 & \mathbf{v}_1 & \dots & \mathbf{v}_{n-1} \end{array}\right]\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$x_0\mathbf{v}_0 + x_1\mathbf{v}_1 + \dots + x_{n-1}\mathbf{v}_{n-1} = \mathbf{b}$$

- Logo, $\mathbf{b}$ é expresso como uma combinação linear de $\mathbf{x}_i$'s
  - $\mathbf{x}_i$'s são assumidos **linearmente independentes**
  - $\mathbf{x}_i$'s geram um subespaço de $\mathbb{R}^m$

Ortogonalização

Sistemas inconsistentes

$$A_{m \times n}\mathbf{x}_n = \mathbf{b}_m, \quad m > n$$

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \mathbf{v}_0 & \mathbf{v}_1 & \dots & \mathbf{v}_{n-1} \end{array} \right] \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$x_0\mathbf{v}_0 + x_1\mathbf{v}_1 + \dots + x_{n-1}\mathbf{v}_{n-1} = \mathbf{b}$$

- Logo, $\mathbf{b}$ é expresso como uma combinação linear de $\mathbf{x}_i$'s
  - $\mathbf{x}_i$'s são assumidos **linearmente independentes**
  - $\mathbf{x}_i$'s geram um subespaço de $\mathbb{R}^m$
- Exemplo
  - Sistema 3×2, $\mathbf{v}_1$ e $\mathbf{v}_2$ geram o plano $A\mathbf{x}$ em $\mathbb{R}^3$

Ortogonalização

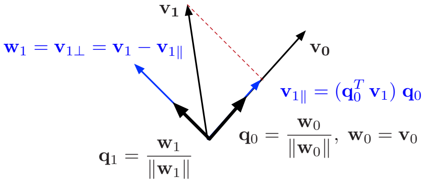
Ortogonalização de vetores

- Dados $\mathbf{v}_i$'s, achar $\mathbf{q}_i$'s, unitários e mutualmente ortogonais
- Vetores $\mathbf{q}_i$'s geram o mesmo subespaço gerado por $\mathbf{v}_i$'s

Ortogonalização

Ortogonalização de vetores

- Dados $\mathbf{v}_i$'s, achar $\mathbf{q}_i$'s, unitários e mutualmente ortogonais
- Vetores $\mathbf{q}_i$'s geram o mesmo subespaço gerado por $\mathbf{v}_i$'s
- Caso n $=$ 2:



$$\mathbf{w}_0 = \mathbf{v}_0 \therefore \mathbf{q}_0 = \frac{\mathbf{w}_0}{\|\mathbf{w}_0\|}$$

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{v}_1 - (\mathbf{q}_0^T \mathbf{v}_1)\mathbf{q}_0 \quad \text{e} \quad \mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{w}_1}{\|\mathbf{w}_1\|}$$

Ortogonalização

Ortogonalização de Gram-Schmidt

- Caso geral

$$
\begin{aligned}
\mathbf{w}_j &= \mathbf{v}_j - (\mathbf{q}_0^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_0 - (\mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_1 - \ldots - (\mathbf{q}_{j-1}^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_{j-1} \\
&= \mathbf{v}_j - \sum_{i=0}^{j-1} (\mathbf{q}_i^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_j \\
\mathbf{q}_j &= \frac{\mathbf{w}_j}{\|\mathbf{w}_j\|}
\end{aligned}
$$

Fatoração QR

Objetivo

- Resolver o método dos mínimos quadrados
  - Sem construir as equações normais
  - Evitando sistemas mal condicionados

Fatoração QR

Objetivo

- Resolver o método dos mínimos quadrados
  - Sem construir as equações normais
  - Evitando sistemas mal condicionados

$$A = QR$$

- Q é uma matriz cujos vetores colunas:
  - São unitários e mutualmente ortogonais
  - São linearmente independentes
  - Geram o mesmo subespaço que os vetores colunas da matriz A
- R é uma matriz triangular superior

Fatoração QR

$$A = QR$$

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \mathbf{v}_0 & \mathbf{v}_1 & \dots & \mathbf{v}_{n-1} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \mathbf{q}_0 & \mathbf{q}_1 & \dots & \mathbf{q}_{n-1} \end{array}\right] \begin{bmatrix} r_{00} & r_{01} & \cdots & r_{0\,n-1} \\ & r_{11} & \cdots & r_{1\,n-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{n-1\,n-1} \end{bmatrix}$$

- Como:

$$\mathbf{w}_j = \mathbf{v}_j - (\mathbf{q}_0^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_0 - (\mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_1 - \dots - (\mathbf{q}_{j-1}^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_{j-1}$$

- Temos

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_j &= (\mathbf{q}_0^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_0 + (\mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_1 + \dots + (\mathbf{q}_{j-1}^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_{j-1} + \mathbf{w}_j \\ &= (\mathbf{q}_0^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_0 + (\mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_1 + \dots + (\mathbf{q}_{j-1}^T \mathbf{v}_j)\mathbf{q}_{j-1} + \|\mathbf{w}_j\|\mathbf{q}_j \end{aligned}$$

- Então:

$$\mathbf{r_{jj}} = \|\mathbf{w_j}\| \quad e \quad \mathbf{r_{ij}} = \mathbf{q_i^T v_j},\, i < j$$

Fatoração QR

Exemplo: Calcule a fatoração QR da matriz A abaixo

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

Fatoração QR

Exemplo: Calcule a fatoração QR da matriz A abaixo

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

Solução:

$$\mathbf{w}_0 = \mathbf{v}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \text{ então: } r_{00} = \|\mathbf{w}_0\| = \sqrt{1^2 + 2^2 + 2^2} = \mathbf{3}$$

Fatoração QR

Exemplo: Calcule a fatoração QR da matriz A abaixo

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

Solução:

$$\mathbf{w}_0 = \mathbf{v}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \text{ então: } r_{00} = \|\mathbf{w}_0\| = \sqrt{1^2 + 2^2 + 2^2} = \mathbf{3}$$

- Calculando o vetor unitário:

$$\mathbf{q}_0 = \frac{\mathbf{w}_0}{\|\mathbf{w}_0\|} = \frac{\mathbf{w}_0}{r_{00}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

Fatoração QR

- Para achar o segundo vetor unitário $\mathbf{q}_1$:

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{v}_1 - (\mathbf{q}_0^T \mathbf{v}_1)\mathbf{q}_0 = \begin{bmatrix} -4 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -4 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{w}_1 = \begin{bmatrix} -4 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} - \mathbf{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{14}{3} \\ \frac{5}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

Fatoração QR

- Para achar o segundo vetor unitário $\mathbf{q}_1$:

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{v}_1 - (\mathbf{q}_0^T \mathbf{v}_1)\mathbf{q}_0 = \begin{bmatrix} -4 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -4 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{w}_1 = \begin{bmatrix} -4 \\ 3 \\ 2 \end{bmatrix} - \mathbf{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{14}{3} \\ \frac{5}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{w}_1}{\|\mathbf{w}_1\|} = \frac{\mathbf{w}_1}{r_{11}} = \frac{1}{\mathbf{5}} \begin{bmatrix} -\frac{14}{3} \\ \frac{5}{3} \\ \frac{2}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{14}{15} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{2}{15} \end{bmatrix}$$

Fatoração QR

- Logo:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{14}{15} \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{15} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 5 \end{bmatrix} = QR$$

Note:

- Q é uma matriz cujos vetor-colunas são unitários ortogonais
- R é uma matriz triangular superior

Fatoração QR

Algoritmo: Ortogonalização clássica de Gram-Schmidt

- Seja $A = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_0 & \mathbf{v}_1 & \dots & \mathbf{v}_{n-1} \end{bmatrix}$
  - Onde $\mathbf{v}_i$'s são linearmente independentes

$$
\begin{array}{l}
\textbf{for } j = 0 \textbf{ to } n-1 \\
\quad \mathbf{w} = \mathbf{v}_j \\
\quad \textbf{for } i = 0 \textbf{ to } j-1 \\
\qquad r_{ij} = \mathbf{q}_i^T \mathbf{v}_j \\
\qquad \mathbf{w} = \mathbf{w} - r_{ij}\mathbf{q}_i \\
\quad r_{jj} = \|\mathbf{w}\| \\
\quad \mathbf{q}_j = \dfrac{\mathbf{w}}{r_{jj}}
\end{array}
$$

- Está é conhecida como **Fatoração QR Reduzida**

Fatoração QR

Aplicação em resolução de sistemas consistentes

$$A_{n\times n}\mathbf{x}_n = \mathbf{b}_n$$

Fatoração QR

Aplicação em resolução de sistemas consistentes

$$A_{n\times n}\mathbf{x}_n = \mathbf{b}_n$$

- Fatoração QR

$$A_{n\times n} = Q_{n\times n}R_{n\times n}$$

Fatoração QR

Aplicação em resolução de sistemas consistentes

$$A_{n\times n}\mathbf{x}_n = \mathbf{b}_n$$

- Fatoração QR

$$A_{n\times n} = Q_{n\times n}R_{n\times n}$$

Definição

- Uma matriz quadrada Q é **ortogonal** se $Q^T = Q^{-1}$
  - Q tem vetor-colunas são unitários ortogonais
  - $\|Q\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|$

Fatoração QR

Aplicação em resolução de sistemas consistentes

$$
\begin{aligned}
A\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\
QR\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\
R\mathbf{x} &= Q^T\mathbf{b}
\end{aligned}
$$

- Procedimento
  - Calcula $Q^T\mathbf{b}$
  - Calcula $\mathbf{x}$ com retro-substituição
    - R é triangular superior

Fatoração QR

Aplicação em resolução de sistemas consistentes

$$
\begin{aligned}
A\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\
QR\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\
R\mathbf{x} &= Q^T\mathbf{b}
\end{aligned}
$$

- Procedimento
  - Calcula $Q^T\mathbf{b}$
  - Calcula $\mathbf{x}$ com retro-substituição
    - R é triangular superior

Problema

- A fatoração QR é $\approx 3\times$ mais cara que a fatoração LU
  - Considerando a ortogonalização de Gram-Schmidt

Fatoração QR

Aplicação para resolução de sistemas inconsistente

- Método dos mínimos quadrados

Fatoração QR

Aplicação para resolução de sistemas inconsistente

- Método dos mínimos quadrados

Fatoração QR cheia

- Transforma Q em matriz quadrada
  - Adicionando vetores colunas linearmente independentes
    - Escolha pode ser arbitrária
- Completa matriz R com zeros

$$\left[\begin{array}{c|c|c|c} \mathbf{v}_0 & \mathbf{v}_1 & \dots & \mathbf{v}_{n-1} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \mathbf{q}_0 & \mathbf{q}_1 & \dots & \mathbf{q}_{m-1} \end{array}\right] \begin{bmatrix} r_{00} & r_{01} & \cdots & r_{0\,n-1} \\ & r_{11} & \cdots & r_{1\,n-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{n-1\,n-1} \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Fatoração QR

Fatoração QR aplicada ao Método dos Mínimos Quadrados

- Objetivo: Minimizar o resíduo $\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$
  - Reescrevendo:

$$\|QR\mathbf{x} - \mathbf{b}\| = \|R\mathbf{x} - Q^T\mathbf{b}\|$$

    - Pois $\|Q\mathbf{v}\| = \|\mathbf{v}\|$ já que Q é ortogonal

Fatoração QR

Fatoração QR aplicada ao Método dos Mínimos Quadrados

- Objetivo: Minimizar o resíduo $\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$
  - Reescrevendo:

$$\|QR\mathbf{x} - \mathbf{b}\| = \|R\mathbf{x} - Q^T\mathbf{b}\|$$

    - Pois $\|Q\mathbf{v}\| = \|\mathbf{v}\|$ já que Q é ortogonal
- Fazendo $\mathbf{d} = Q^T\mathbf{b}$, temos:

$$\begin{bmatrix} e_0 \\ e_1 \\ \vdots \\ e_{n-1} \\ e_n \\ \vdots \\ e_{m-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{00} & r_{01} & \cdots & r_{0\,n-1} \\ & r_{11} & \cdots & r_{1\,n-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{n-1\,n-1} \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ \vdots \\ x_{n-1} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} d_0 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \\ \vdots \\ d_{m-1} \end{bmatrix}$$

Fatoração QR

Fatoração QR aplicada ao Método dos Mínimos Quadrados

- Para o erro ser mínimo, fazemos $e_0 = e_1 = ... = e_{n-1} = 0$
- Usando retro-substituição, achamos $x_0, ..., x_{n-1}$
  - $x_0, ..., x_{n-1}$ representa a solução fornecida pelo MMQ

$$R_{n\times n}\mathbf{x}_n = \mathbf{d}_n$$

- Assim, $(e_n, ..., e_{m-1}) = (d_n, ..., d_{m-1})$, e:

$$\|\mathbf{e}\|^2 = d_n^2 + ... + d_{m-1}^2$$

  - Representando o erro dos MMQ

Fatoração QR

Fatoração QR aplicada ao Método dos Mínimos Quadrados

- Para o erro ser mínimo, fazemos $e_0 = e_1 = ... = e_{n-1} = 0$
- Usando retro-substituição, achamos $x_0, ..., x_{n-1}$
  - $x_0, ..., x_{n-1}$ representa a solução fornecida pelo MMQ

$$R_{n \times n} \mathbf{x}_n = \mathbf{d}_n$$

- Assim, $(e_n, ..., e_{m-1}) = (d_n, ..., d_{m-1})$, e:

$$\|\mathbf{e}\|^2 = d_n^2 + ... + d_{m-1}^2$$

  - Representando o erro dos MMQ

Observação

- Note que $\mathbf{q}_n, ..., \mathbf{q}_{m-1}$ não são necessários para achar $\mathbf{x}$

Fatoração QR

Exemplo: Fatoração QR para resolução do MMQ

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix}$$

Fatoração QR

Exemplo: Fatoração QR para resolução do MMQ

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix}$$

- Completando a matriz Q e determinando $Q^T \mathbf{b}$
  - A fatoração QR reduzida de A está no exemplo anterior

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{14}{15} & q_0' \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & q_1' \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{15} & q_2' \end{bmatrix} \quad \therefore \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{14}{15} & \frac{1}{3} & \frac{2}{15} \\ q_0' & q_1' & q_2' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 \\ 9 \\ d_2 \end{bmatrix}$$

Fatoração QR

Exemplo: Fatoração QR para resolução do MMQ

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -4 \\ 2 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix}$$

- Completando a matriz Q e determinando $Q^T\mathbf{b}$
  - A fatoração QR reduzida de A está no exemplo anterior

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{14}{15} & q_0' \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & q_1' \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{15} & q_2' \end{bmatrix} \quad \therefore \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{14}{15} & \frac{1}{3} & \frac{2}{15} \\ q_0' & q_1' & q_2' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -3 \\ 15 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 \\ 9 \\ d_2 \end{bmatrix}$$

- Resolvendo o sistema consistente: $R\mathbf{x} = \mathbf{d}$
  - Parte superior da equação

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 \\ 9 \end{bmatrix} \quad \therefore \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 3.8 \\ 1.8 \end{bmatrix}$$

Fatoração QR

Ortogonalização de Gram-Schmidt modificada

- Melhora a precisão do procedimento computacional
- Substitui $\mathbf{v}_j$ por $\mathbf{w}_j$ no ciclo mais interno

$$
\begin{array}{l}
\textbf{for } j = 0 \textbf{ to } n-1 \\
\quad \mathbf{w} = \mathbf{v}_j \\
\quad \textbf{for } i = 0 \textbf{ to } j-1 \\
\quad\quad r_{ij} = \mathbf{q}_i^T \mathbf{w} \qquad\qquad \longleftarrow \\
\quad\quad \mathbf{w} = \mathbf{w} - r_{ij}\mathbf{q}_i \\
\quad r_{jj} = \|\mathbf{w}\| \\
\quad \mathbf{q}_j = \dfrac{\mathbf{w}}{r_{jj}}
\end{array}
$$

Ortogonalização de Gram-Schmidt

Considere o exemplo:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \delta & \delta/2 & \delta/3 \\ \delta/2 & \delta/3 & \delta/4 \\ \delta/3 & \delta/4 & \delta/5 \end{bmatrix}, \text{ com } \delta = 10^{-10}$$

Ortonogalização de Gram-Schmidt: $Q^T Q$

- Original

```
      1             -1.14527e-10    -1.15123e-10
-1.14527e-10             1           0.999574
-1.15123e-10         0.999574           1
```

- Modificado

```
      1               -1.14527e-10    -2.20872e-11
-1.14527e-10               1          -5.64826e-15
-2.20872e-11          -5.64826e-15         1
```

Refletor de Householder

Reflexão de vetor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ em relação a um plano em $\mathbb{R}^{m-1}$

- Na reflexão, magnitudes dos vetores são preservados
  - Operação não amplia erros

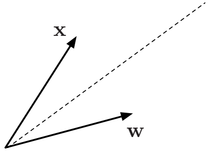
Refletor de Householder

Reflexão de vetor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ em relação a um plano em $\mathbb{R}^{m-1}$

- Na reflexão, magnitudes dos vetores são preservados
  - Operação não amplia erros

- Caso $m = 2$

$$H\mathbf{x} = \mathbf{w}$$



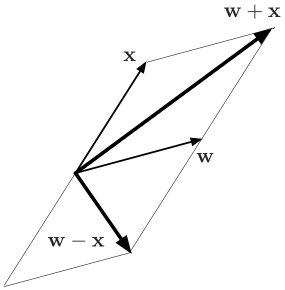
Refletor de Householder

Reflexão de vetor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ em relação a um plano em $\mathbb{R}^{m-1}$

- Na reflexão, magnitudes dos vetores são preservados
  - Operação não amplia erros

- Caso $m = 2$

$$H\mathbf{x} = \mathbf{w}$$



- Como $\mathbf{x}$ e $\mathbf{w}$ têm mesma magnitude

$$\mathbf{w} - \mathbf{x} \perp \mathbf{w} + \mathbf{x}$$

  - De fato:

$$(\mathbf{w} - \mathbf{x})^T(\mathbf{w} + \mathbf{x}) =$$
$$= \mathbf{w}^T\mathbf{w} - \mathbf{x}^T\mathbf{w} + \mathbf{w}^T\mathbf{x} - \mathbf{x}^T\mathbf{x} =$$
$$= \|\mathbf{w}\|^2 - \|\mathbf{x}\|^2 = 0$$

Refletor de Householder

Definição: **Matriz de projeção**

- Uma matriz de projeção P satisfaz $P^2 = P$

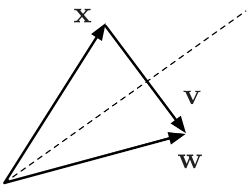
Refletor de Householder

Definição: **Matriz de projeção**

- Uma matriz de projeção P satisfaz $P^2 = P$

Fazendo:

$$\mathbf{v} = \mathbf{w} - \mathbf{x}$$



Considera-se a matriz de projeção:

$$P = \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}}$$

- P é uma matriz simétrica de projeção
- $P\mathbf{u}$ é a projeção de $\mathbf{u}$ em $\mathbf{v}$
  - Logo, $P\mathbf{v} = \mathbf{v}$

Refletor de Householder

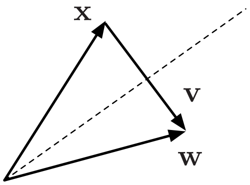
Pela figura, $\mathbf{x} - 2P\mathbf{x} = \mathbf{w}$

$$H = I - 2P$$

Refletor de Householder

Pela figura, $\mathbf{x} - 2P\mathbf{x} = \mathbf{w}$

$$H = I - 2P$$



- Note:

$$\begin{aligned}
H\mathbf{x} &= \mathbf{x} - 2P\mathbf{x} \\
&= (\mathbf{w} - \mathbf{v}) - \frac{2\mathbf{v}\mathbf{v}^T\mathbf{x}}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} \\
&= (\mathbf{w} - \mathbf{v}) - \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T\mathbf{x}}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} - \mathbf{v}\mathbf{v}^T\frac{\mathbf{w} - \mathbf{v}}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} \\
&= \mathbf{w} - \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T(\mathbf{x} + \mathbf{w})}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}}
\end{aligned}$$

- Como $\mathbf{w} + \mathbf{x}$ é ortogonal a $\mathbf{v} = \mathbf{w} - \mathbf{x}$

$$H\mathbf{x} = \mathbf{w}$$

Refletor de Householder

Refletor Householder H

- Matriz simétrica
- Matriz ortogonal

$$\begin{aligned} H^T H &= HH = (I - 2P)(I - 2P) \\ &= I - 4P + 4P^2 \\ &= I \end{aligned}$$

Refletor de Householder

Fatoração QR via refletor de Householder

- Transformar A numa matriz triangular superior
  - Aplicação de refletores em sequência

Refletor de Householder

Fatoração QR via refletor de Householder

- Transformar A numa matriz triangular superior
  - Aplicação de refletores em sequência

Tratamento do primeiro vetor coluna

$$H_0 A = H_0 \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix}$$

- Transformar primeiro vetor coluna $\mathbf{x}$ em $\mathbf{w}$
  - Como usaremos H, $\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{w}\|$

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \pm\|\mathbf{x}\|^2 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}^T$$

  - Para estabilidade numérica, faz-se w_0 ter sinal oposto a x_0

Refletor de Householder

Tratamento do segundo vetor coluna

- Definimos

$$H_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & & \hat{H}_1 & \\ 0 & & & \end{bmatrix}$$

$$H_1 H_0 A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & & \hat{H}_1 & \\ 0 & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$

- Transformar segundo vetor coluna **x** em **w**

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \pm\|x_1\|^2 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$$

Refletor de Householder

Tratamento do terceiro vetor coluna

- Definimos

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & & \hat{H}_2 \end{bmatrix}$$

$$H_2 H_1 H_0 A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & & \hat{H}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- Transformar terceiro vetor coluna **x** em **w**

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} \pm\|x_2\|^2 & 0 \end{bmatrix}^T$$

Refletor de Householder

Recordando

- Achar H que reflete $\mathbf{x}$ em $\mathbf{w}$
  - Define
  $$\mathbf{v} = \mathbf{w} - \mathbf{x}$$
  - Constrói matriz de projeção
  $$P = \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}}$$
  - Constrói H
  $$H = I - 2P$$

Refletor de Householder

Fatoração QR via refletor de Householder

$$H_{n-1}H_{n-2}...H_0A = R$$

- Como $H_i^{-1} = H_i$ (simétrica ortogonal)

$$A = H_0H_1...H_{n-1}R = QR$$

  - onde: $Q = H_0H_1...H_{n-1}$

Refletor de Householder

Configuração final se $m > n + 1$

$$H_{n-1}H_{n-2}...H_0A =$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 1 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & & \\ 0 & \dots & 0 & & \hat{H_{n-1}} \\ 0 & \dots & 0 & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$

- Se $m > n$, faz-se n reflexões
- Se $m = n$, faz-se $m - 1$ reflexões

Refletor de Householder

Algoritmo: Fatoração QR via refletor de Householder

- Entrada: $A_{m\times n}$
- Saída: $Q_{m\times m}R_{m\times n}$

$$
\begin{array}{l}
Q = \mathbf{I}_{m\times m} \\
\textbf{for } i = 0 \textbf{ to } \min(n-1, m-2) \\
\quad \mathbf{x} = A_{i:m-1,i} \\
\quad \mathbf{w} = \mathbf{0}_{m-i} \\
\quad w_0 = -\text{sign}(x_0)\,\|\mathbf{x}\| \\
\quad \mathbf{v} = \mathbf{w} - \mathbf{x} \\
\quad H = \mathbf{I}_{m\times m} \\
\quad H_{i:m-1,i:m-1} = \mathbf{I}_{m-i,m-i} - 2\dfrac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} \\
\quad Q = QH \\
\quad A = HA
\end{array}
$$

Ortogonalização

Retomando o exemplo:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \delta & \delta/2 & \delta/3 \\ \delta/2 & \delta/3 & \delta/4 \\ \delta/3 & \delta/4 & \delta/5 \end{bmatrix}, \text{ com } \delta = 10^{-10}$$

- Ortonogalização de Gram-Schmidt modificada: $Q^T Q$

```
      1              -1.14527e-10    -2.20872e-11
-1.14527e-10             1           -5.64826e-15
-2.20872e-11         -5.64826e-15        1
```

- Ortonogalização por refletor de Householder: $Q^T Q$

```
      1         -8.88573e-27       0          -6.46235e-27
-8.88573e-27          1        4.16334e-17   -1.38778e-17
      0          4.16334e-17       1          -3.33067e-16
-6.46235e-27    -1.38778e-17  -3.33067e-16        1
```

Método dos Mínimos Quadrados

Equações normais: Matriz de Van der Monde

- Nossa solução com Refletor Householder

```
Solucao de Van der Monde:
c[0] = 1
c[1] = 1
c[2] = 1
c[3] = 1
c[4] = 1
c[5] = 1
c[6] = 1
c[7] = 1
Residuo:
r[0] = -1.36424e-12
r[1] = 1.13687e-13
r[2] = -3.75167e-12
r[3] = -2.27374e-12
r[4] = -4.54747e-13
r[5] = -4.54747e-13
r[6] = -2.72848e-12
r[7] = 9.09495e-13
```