# Fatoração QR e seu uso para resolver o problema de quadrados mínimos

Dyckson Ternoski Marina Sayuri Vieira Monique Baptista Fragozo Otávio Dittrich Moreira

Orientador: Prof. Abel Soares Siqueira

J3M - 06 de novembro de 2019 UFPR - Universidade Federal do Paraná

Introdução e Motivação

Um dos problemas mais importantes em aplicações matemáticas é a resolução de sistemas lineares da forma:

$$Ax = b (1)$$

onde  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  e b  $\in \mathbb{R}^m$ .

1

Quando m > n, temos um sistema com mais equações do que incógnitas e (1) pode não ter solução. Nesse caso, a melhor estratégia é resolver o **Problema de Quadrados Mínimos**:

Quando m > n, temos um sistema com mais equações do que incógnitas e (1) pode não ter solução. Nesse caso, a melhor estratégia é resolver o **Problema de Quadrados Mínimos**:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2$$

Isso envolve resolver o sistema

$$A^t A x = A^t b$$

o qual possui solução única

$$X = (A^t A)^{-1} A^t b$$

sempre que A tem vetores coluna L.I.

Isso envolve resolver o sistema

$$A^t A x = A^t b$$

o qual possui solução única

$$X = (A^t A)^{-1} A^t b$$

sempre que A tem vetores coluna L.I.

Porém, a inversão de matrizes é computacionalmente custosa. Haveria uma forma de evitá-la?

## Decomposição QR

**Definição 1:** Um conjunto de vetores  $q_1, q_2, ..., q_n$  é dito ortonormal quando são ortogonais dois a dois e tem norma unitária, ou seja:

**Definição 1:** Um conjunto de vetores  $q_1, q_2, ..., q_n$  é dito ortonormal quando são ortogonais dois a dois e tem norma unitária, ou seja:

$$\langle q_i, q_j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

**Definição 1:** Um conjunto de vetores  $q_1, q_2, ..., q_n$  é dito ortonormal quando são ortogonais dois a dois e tem norma unitária, ou seja:

$$\langle q_i, q_j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

Uma matriz Q é dita ortogonal quando seus vetores coluna são ortonormais, ou seja,  $Q^tQ=I$ .

4

**Exemplo 1:** (Rotações) Toda matriz de rotação é ortogonal. A matriz  $Q_{\theta}$  que rotaciona um vetor no plano por um ângulo  $\theta$  é:

$$Q_{\theta} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Exemplo 1: (Rotações) Toda matriz de rotação é ortogonal.

A matriz  $Q_{\theta}$  que rotaciona um vetor no plano por um ângulo  $\theta$  é:

$$Q_{\theta} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Logo, os vetores coluna são:

$$q_1 = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix} q_2 = \begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$

Portanto:

$$\langle q_1, q_1 \rangle = \cos(\theta)^2 + \sin(\theta)^2 = 1$$

$$\langle q_2, q_2 \rangle = (-\sin(\theta))^2 + \cos(\theta)^2 = 1$$

$$\langle q_1, q_2 \rangle = \cos(\theta)(-\sin(\theta)) + \sin(\theta)\cos(\theta) = 0$$

$$\langle q_2, q_1 \rangle = (-\sin(\theta))\cos(\theta) + \cos(\theta)\sin(\theta) = 0$$

**Proposição 1:** Se Q é uma matriz ortogonal então Q preserva a norma.

**Proposição 1:** Se Q é uma matriz ortogonal então Q preserva a norma.

$$||Qv||_2^2 = (Qv)^t Qv = v^t Q^t Qv = v^t v = ||v||_2^2$$

6

**Proposição 2:** O produto de matrizes ortogonais é uma matriz ortogonal.

**Proposição 2:** O produto de matrizes ortogonais é uma matriz ortogonal.

Demonstração: Se  $Q_1$  e  $Q_2$  são matrizes ortogonais, então:

$$(Q_1Q_2)^t(Q_1Q_2) = Q_2^tQ_1^tQ_1Q_2$$
  
=  $Q_2^tQ_2$   
= I

7

**Proposição 2:** O produto de matrizes ortogonais é uma matriz ortogonal.

Demonstração: Se  $Q_1$  e  $Q_2$  são matrizes ortogonais, então:

$$(Q_1Q_2)^t(Q_1Q_2) = Q_2^tQ_1^tQ_1Q_2$$
  
=  $Q_2^tQ_2$   
= I

Ou seja,  $Q_1Q_2$  é ortogonal. É facilmente estendido por indução para n matrizes.

7

#### Decomposição QR

**Definição 2:** Dizemos que o par de matrizes (Q, R) é a decomposição QR de A quando:

$$A = QR$$

Sendo Q ortogonal e R triangular superior.

#### Decomposição QR

**Definição 2:** Dizemos que o par de matrizes (Q, R) é a decomposição QR de A quando:

$$A = QR$$

Sendo Q ortogonal e R triangular superior.

Como podemos calcular a decomposição QR?

**Teorema 1:** Seja  $A \in R^{m \times n}$  com colunas L.I.. Podemos usar o processo de Gram-Schmidt nas colunas  $a_1, a_2, \ldots, a_n$  da matriz A e normalizá-las, obtendo elementos  $q_1, q_2, \ldots, q_n$  para encontrar a decomposição QR, sendo:

$$Q = (q_1 q_2 \dots q_n) e R = Q^t A$$

**Teorema 1:** Seja  $A \in R^{m \times n}$  com colunas L.I.. Podemos usar o processo de Gram-Schmidt nas colunas  $a_1, a_2, \ldots, a_n$  da matriz A e normalizá-las, obtendo elementos  $q_1, q_2, \ldots, q_n$  para encontrar a decomposição QR, sendo:

$$Q = (q_1 q_2 \dots q_n) e R = Q^t A$$

Ou seja,

$$w_i = a_i - \sum_{j=1}^{i-1} \langle q_j, a_i \rangle q_j \Rightarrow q_i = \frac{w_i}{\|w_i\|} \quad \forall i = 1, \dots, n$$

е

$$R_{ij} = \begin{cases} \langle q_i, a_j \rangle & \text{se } i \leqslant j \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

9

**Exemplo 2:** Calcular a decomposição QR pelo processo de Gram-Shcmidt da matriz :

$$A = \left(\begin{array}{rrr} 1 & 2 & 3 \\ -1 & 0 & -3 \\ 0 & -2 & 3 \end{array}\right)$$

**Exemplo 2:** Calcular a decomposição QR pelo processo de Gram-Shcmidt da matriz :

$$A = \left(\begin{array}{rrr} 1 & 2 & 3 \\ -1 & 0 & -3 \\ 0 & -2 & 3 \end{array}\right)$$

Aplicando Gram-Schmidt nas colunas de A e normalizando-as, obtemos:

$$q_{1} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad q_{2} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ -2/\sqrt{6} \end{pmatrix} \quad q_{3} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

Assim:

$$Q = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 0 & -2/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

е

$$R = Q^{t}A = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{18} \\ 0 & \sqrt{6} & -\sqrt{6} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}$$

Podemos também encontrar a decomposição QR por um método chamado **Rotações de Givens**:

Podemos também encontrar a decomposição QR por um método chamado **Rotações de Givens**:

**Teorema 2**: Se A é uma matriz com vetores coluna L.I., então existem matrizes de rotação  $Q_1, Q_2, \ldots, Q_n$  tais que:

$$Q_1Q_2\dots Q_nA=R$$

Sendo R triangular superior.

Portanto, se  $Q = Q_n^t Q_{n-1}^t \dots Q_1^t$ , então:

$$A = QR$$

é uma decomposição QR de A.

Para o caso em que  $A \in \mathbb{R}^{5 \times 5}$ 

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} \end{pmatrix}$$

Teremos:

$$cos(\theta_{21}) = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}} \ sen(\theta_{21}) = \frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}$$

$$\begin{pmatrix} cos(\theta_{21}) & sen(\theta_{21}) & 0 & 0 & 0 \\ -sen(\theta_{21}) & cos(\theta_{21}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} A$$

$$cos(\theta_{21}) = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}} \ sen(\theta_{21}) = \frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}$$

$$\begin{pmatrix} cos(\theta_{21}) \ sen(\theta_{21}) \ 0 \ 0 \ 0 \\ -sen(\theta_{21}) \ cos(\theta_{21}) \ 0 \ 0 \ 0 \\ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \\ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \\ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \end{pmatrix} A$$

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} \ a_{12}^{(1)} \ a_{13}^{(1)} \ a_{14}^{(1)} \ a_{15}^{(1)} \\ 0 \ a_{22}^{(1)} \ a_{23}^{(1)} \ a_{24}^{(1)} \ a_{25}^{(1)} \\ a_{31} \ a_{32} \ a_{33} \ a_{34} \ a_{35} \\ a_{41} \ a_{42} \ a_{43} \ a_{44} \ a_{45} \\ a_{51} \ a_{52} \ a_{53} \ a_{54} \ a_{55} \end{pmatrix}$$

$$cos(\theta_{31}) = \frac{a_{11}^{(1)}}{\sqrt{a_{11}^{(1)2} + a_{31}^2}} \quad sen(\theta_{31}) = \frac{a_{31}}{\sqrt{a_{11}^{(1)2} + a_{31}^2}}$$

$$\begin{pmatrix} cos(\theta_{31}) & 0 & sen(\theta_{31}) & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0\\ -sen(\theta_{31}) & 0 & cos(\theta_{31}) & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} Q_{21}A$$

$$cos(\theta_{31}) = \frac{a_{11}^{(1)}}{\sqrt{a_{11}^{(1)2} + a_{31}^2}} sen(\theta_{31}) = \frac{a_{31}}{\sqrt{a_{11}^{(1)2} + a_{31}^2}}$$

$$\begin{pmatrix} cos(\theta_{31}) & 0 & sen(\theta_{31}) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -sen(\theta_{31}) & 0 & cos(\theta_{31}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} Q_{21}A$$

$$\downarrow \downarrow$$

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & a_{14}^{(2)} & a_{15}^{(2)} \\ 0 & a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & a_{24}^{(2)} & a_{25}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & a_{34}^{(1)} & a_{35}^{(1)} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} \end{pmatrix}$$

E assim por diante, até chegarmos no último passo:

$$\cos(\theta_{54}) = \frac{a_{44}^{(3)}}{\sqrt{a_{44}^{(3)2} + a_{54}^2}} \quad sen(\theta_{54}) = \frac{a_{54}}{\sqrt{a_{44}^{(3)2} + a_{54}^2}}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & cos(\theta_{54}) & sen(\theta_{54}) \\ 0 & 0 & 0 & -sen(\theta_{54}) & cos(\theta_{54}) \end{pmatrix} Q_{53}Q_{43}Q_{52}Q_{42}Q_{32}Q_{51}Q_{41}Q_{31}Q_{21}A$$

E assim por diante, até chegarmos no último passo:

$$\cos(\theta_{54}) = \frac{a_{44}^{(3)}}{\sqrt{a_{44}^{(3)2} + a_{54}^2}} \quad sen(\theta_{54}) = \frac{a_{54}}{\sqrt{a_{44}^{(3)2} + a_{54}^2}}$$

Como cada matriz Q<sub>ii</sub> é ortogonal,então:

$$A = (Q_{54}Q_{53}Q_{43}Q_{52}Q_{42}Q_{32}Q_{51}Q_{41}Q_{31}Q_{21})^{t} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & r_{15} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25} \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} & r_{35} \\ 0 & 0 & 0 & r_{44} & r_{45} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & r_{55} \end{pmatrix}$$

Logo, se

$$Q = (Q_{54}Q_{53}Q_{43}Q_{52}Q_{42}Q_{32}Q_{51}Q_{41}Q_{31}Q_{21})^{t}$$

Ε

$$R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & r_{15} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25} \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} & r_{35} \\ 0 & 0 & 0 & r_{44} & r_{45} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & r_{55} \end{pmatrix}$$

Então, pela proposição 2, Q é ortogonal. Portanto (Q,R) é uma decomposição QR de A.

Como a decomposição QR ajuda no Problema de Quadrados Mínimos?

Como a decomposição QR ajuda no Problema de Quadrados Mínimos?

Se A = QR, pela Proposição 1, podemos resolver o Problema de Quadrados Mínimos de (A, b) como

$$||Ax - b||_2^2 = ||QRx - b||_2^2$$

$$= ||Q^t(QRx - b)||_2^2$$

$$= ||Rx - Q^tb||_2^2$$

$$= ||\hat{R}x - c||_2^2 + ||d||_2^2$$

Onde

$$R = \begin{pmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{pmatrix} \quad Q^t b = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$$

Assim, basta resolver o sistema triangular  $\hat{R}x = c$ 

**Exemplo 3:** Ajuste de curva por uma reta nos seguintes pontos:

Χ	0	1	2	3	4
У	-5	0	5	12	24

**Exemplo 3:** Ajuste de curva por uma reta nos seguintes pontos:

Х	0	1	2	3	4
У	-5	0	5	12	24

Assim, sendo y = ax + c a reta procurada, temos: 
$$\begin{cases} 0a+c=-5\\ 1a+c=0\\ 2a+c=5\\ 3a+c=12\\ 4a+c=24 \end{cases}$$

Reescrevendo o sistema linear de equações como Ax = b, com  $A \in \mathbb{R}^{5 \times 2}$  e b  $\in \mathbb{R}^{5 \times 1}$  obtemos :

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} -5 \\ 0 \\ 5 \\ 12 \\ 24 \end{pmatrix}$$

Calculando a decomposição QR de A, obtemos:

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0.774597 \\ 0.182574 & 0.516398 \\ 0.365148 & 0.258199 \\ 0.547723 & 0 \\ 0.730297 & -0.258199 \end{pmatrix}$$

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} 5.47723 & 1.82574 \\ 0 & 1.29099 \end{pmatrix} \quad c = \begin{pmatrix} 25.92553 \\ -8.77876 \end{pmatrix}$$

Calculando a decomposição QR de A, obtemos:

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0.774597 \\ 0.182574 & 0.516398 \\ 0.365148 & 0.258199 \\ 0.547723 & 0 \\ 0.730297 & -0.258199 \end{pmatrix}$$

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} 5.47723 & 1.82574 \\ 0 & 1.29099 \end{pmatrix} \quad c = \begin{pmatrix} 25.92553 \\ -8.77876 \end{pmatrix}$$

Resolvendo  $\hat{R}x = c$ :

$$x = \left(\begin{array}{c} 7 \\ -6.8 \end{array}\right)$$

Logo, a reta que melhor ajusta a curva é:

$$y \approx 7x - 6.8$$

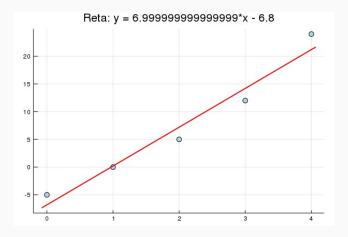


Figura 1: Gráfico do Exemplo 3.

Qual dos métodos de fatoração é computacionalmente melhor? Vamos analisar os dados do exemplo anterior:

Qual dos métodos de fatoração é computacionalmente melhor? Vamos analisar os dados do exemplo anterior:

	Tempo	Alocações	Memória
Gram-Schmidt	0.0000009651 segundos	24	2.66 KiB
Rotação	0.0000052995 segundos	151	16.78 KiB

Vemos que, para este exemplo, Gram-Schmidt é mais eficiente. Vejamos agora outros exemplos:

**Exemplo 4**: Matriz esparsa  $50 \times 50$  aleatória.

	Tempo	Alocações	Memória
Gram-Schmidt	0.0018660880 segundos	7760	4.482 MiB
Rotação	0.0000968360 segundos	255	227.344 KiB

Aqui, rotação de Givens é o método mais vantajoso.

**Exemplo 4**: Matriz esparsa  $50 \times 50$  aleatória.

	Tempo	Alocações	Memória
Gram-Schmidt	0.0018660880 segundos	7760	4.482 MiB
Rotação	0.0000968360 segundos	255	227.344 KiB

Aqui, rotação de Givens é o método mais vantajoso.

**Exemplo 5**: Matriz densa  $100 \times 100$  aleatória.

	Tempo	Alocações	Memória
Gram-Schmidt	0.0161613560 segundos	30580	29.833 MiB
Rotação	0.0524124630 segundos	99020	84.979 MiB

Desta vez, Gram-Schmidt teve melhor desempenho.

Voltamos a nossa pergunta inicial:

"É possível evitar o alto custo computacional do uso da inversa de matrizes?"

Voltamos a nossa pergunta inicial:

"É possível evitar o alto custo computacional do uso da inversa de matrizes?"

**Exemplo 6**: Matriz  $5 \times 5$  aleatória.

	Tempo	Alocações	Memória
Gram-Schmidt	0.000009102 segundos	101	12.67 KiB
Rotação	0.000007645 segundos	90	12.06 KiB
$x = (A^t A)^{-1} A^t B$	0.0000207507 segundos	230	29.81 KiB

Como a decomposição QR por rotações de Givens depende da necessidade de zerar elementos, então com **matrizes esparsas** o gasto é mínimo.

$$A = \left(\begin{array}{ccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & 0 \end{array}\right)$$

Exemplo de matriz esparsa (precisamos zerar apenas dois elementos)

Já para **matrizes densas**, Gram-Schmidt é melhor, pois agora o método da rotação não "pulará" entradas de A, e realizará portanto, muitas alocações.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 & 2 & 12 \\ 4 & 1 & 1 & 3 & 11 \\ 5 & 2 & \pi & 4 & 5 \\ 7 & 1 & 2 & 7 & 9 \\ 2 & 5 & 7 & 8 & 1 \end{pmatrix}$$

Por fim, podemos afirmar que a escolha do método de decomposição QR depende das características da matriz escolhida.

Entretanto é sempre uma vantagem preferir QR à inversão de matrizes, devido à economia de tempo, alocações e memória.

# Objetivos futuros

#### Objetivos futuros

- → Criar uma alternativa computacional ao método das Reflexões de Householder. Para isso:
- Desenvolver uma função seletora dos métodos estudados
- Diminuir o gasto de memória

#### Referências

- [1] ARAUJO, T. P. Álgebra Linear: Teoria e Aplicações: 1. Ed. Rio de Janeiro: SBM, 2014.
- [2] STRANGE, G. *Introduction to Linear Algebra: 4. Ed.* Wellesley: Wellesley-Cambridge Press, 2009.
- [3] WATKINS, D. S. Fundamentals of Matrix Computations: 2. Ed. New York: Wiley-Interscience, 2002.

https://github.com/dycksont/Fatoracao-QR-e-Quadrados-Minimos

Obrigado!