Problema de Mínimos Quadrados

Decomposição QR

Completa e Reduzida

Teorema: Qualquer matriz A de ordem $m \times n$, com $m \geqslant n$, pode ser decomposta no produto de uma matriz ortogonal com uma matriz "triangular superior".

Em outras palavras, A tem uma decomposição QR da forma:

$$A = QR, \quad \text{com} \quad R = \begin{bmatrix} \hat{R} \\ \theta \end{bmatrix} \tag{1}$$

onde

- Q é uma matriz ortogonal, de ordem m;
- $\hat{R}$ é uma matriz triangular superior, de ordem n;
- θ é a matriz nula, de ordem $(m-n) \times n$.

Além disso, se $\mathrm{posto}(A) = n$, ou seja, as colunas de A são $\mathrm{L.I.}$, então $\hat{R}$ será não-singular ($\det(\hat{R}) \neq 0$).

Particionando Q da forma

$$Q = \begin{bmatrix} \hat{Q} & Q_1 \end{bmatrix}$$

onde

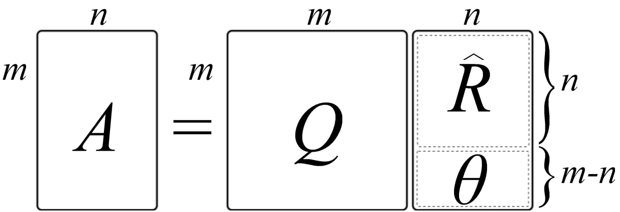
- $\hat{Q}$ é uma matriz de ordem $m \times n$, com colunas ortonormais;
- Q_1 é uma matriz de ordem $m \times (m-n)$, com colunas ortonormais.

Temos que

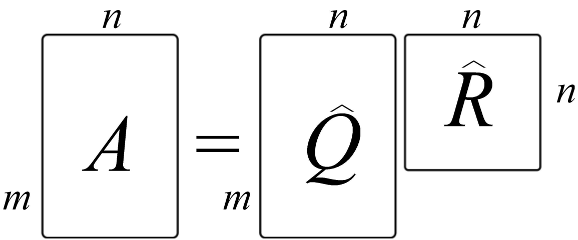
$$A = QR = \begin{bmatrix} \hat{Q} & Q_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{R} \\ \theta \end{bmatrix} = \hat{Q}\hat{R} \tag{2}$$

Definição: Seja A uma matriz de ordem $m \times n$, com $m \geqslant n$. Então

- a decomposição QR completa de A, é a decomposição da forma QR, em (1);
- a decomposição QR reduzida de A, é a decomposição da forma $\hat{Q}\hat{R}$, em (2).



Decomposição QR completa



Decomposição QR reduzida

Existência e Unicidade

Teorema: Para toda matriz A de ordem $m \times n$ existe uma decomposição QR completa, e portanto também uma decomposição QR reduzida.

Teorema: Para toda matriz A de ordem $m \times n$, com posto completo, isto é $\mathrm{posto}(A) = n$, tem uma única decomposição QR reduzida

$$A = \hat{Q}\hat{R}, \quad \text{com} \quad \hat{r}_{jj} > 0.$$

Como obter estas decomposições QR?

A decomposição QR completa de uma matriz pode ser vista como uma triangularização ortogonal. A ideia é formar Q à custa do produto de n matrizes ortogonais de ordem m:

$$Q_n Q_{n-1} \dots Q_2 Q_1 A = R$$

o que é equivalente a

$$A = QR$$

com $Q = Q_1^T Q_2^T \dots Q_n^T = Q_1 Q_2 \dots Q_{n-1} Q_n$.

Observação:

- Desde que Q é o produto de matrizes ortogonais, então ela é uma matriz ortogonal.
- Uma forma de obter as matrizes Q_i's é usando a método de Householder, ou seja, adaptando o Algoritmo HH para matrizes de ordem $m \times n$.

Ou seja, este processo se desenvolve de acordo o seguinte esquema:

$$
\underset{A}{\begin{bmatrix}
\times & \times & \times & \dots & \times & \times \\
\times & \times & \times & \dots & \times & \times \\
\times & \times & \times & \dots & \times & \times \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
\times & \times & \times & \dots & \times & \times
\end{bmatrix}}
\xrightarrow{Q_1}
\underset{Q_1 A}{\begin{bmatrix}
\bar{\times} & \bar{\times} & \bar{\times} & \dots & \bar{\times} & \bar{\times} \\
0 & \bar{\times} & \bar{\times} & \dots & \bar{\times} & \bar{\times} \\
0 & \bar{\times} & \bar{\times} & \dots & \bar{\times} & \bar{\times} \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
0 & \bar{\times} & \bar{\times} & \dots & \bar{\times} & \bar{\times}
\end{bmatrix}}
\xrightarrow{Q_2}
$$

$$
\underset{Q_2 Q_1 A}{\begin{bmatrix}
\bar{\times} & \bar{\times} & \bar{\times} & \dots & \bar{\times} & \bar{\times} \\
0 & \overset{=}{\times} & \overset{=}{\times} & \dots & \overset{=}{\times} & \overset{=}{\times} \\
0 & 0 & \overset{=}{\times} & \dots & \overset{=}{\times} & \overset{=}{\times} \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \overset{=}{\times} & \dots & \overset{=}{\times} & \overset{=}{\times}
\end{bmatrix}}
\xrightarrow{Q_3} \dots \xrightarrow{Q_n}
\underset{Q_n \dots Q_2 Q_1 A}{\begin{bmatrix}
\bar{\times} & \bar{\times} & \bar{\times} & \dots & \bar{\times} & \bar{\times} \\
0 & \overset{=}{\times} & \overset{=}{\times} & \dots & \overset{=}{\times} & \overset{=}{\times} \\
\vdots & 0 & \overset{\equiv}{\times} & \ddots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \tilde{\times} & \overset{\approx}{\times} \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \overset{\approx}{\times} \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0
\end{bmatrix}}
$$

Assim, dada a decomposição QR completa podemos obter a decomposição QR reduzida fazendo:

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} \bar{\times} & \bar{\times} & \bar{\times} & \dots & \bar{\times} & \bar{\times} \\ 0 & \bar{\bar{\times}} & \bar{\bar{\times}} & \dots & \bar{\bar{\times}} & \bar{\bar{\times}} \\ \vdots & 0 & \bar{\bar{\bar{\times}}} & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \tilde{\times} & \tilde{\tilde{\times}} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \tilde{\tilde{\times}} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{Q} = \begin{bmatrix} Q(:,1) & Q(:,2) & \dots & Q(:,n) \end{bmatrix}$$

ou seja, $\hat{Q}$ é formada pelas n primeiras colunas da matriz Q.

Algoritmo HH para matrizes de ordem $m \times n$:

Passo 0: Dada uma matriz A de ordem $m \times n$, faça:

$$A_1 = A$$

Passo 1: $x \in \mathbb{R}^m$ igual à primeira coluna de A_1, isto é $x = A_1(:, 1)$,
$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m$ e determine:

i. $\alpha_1 = \|x\|$;

ii. $v = x - \alpha_1 e_1$;

iii. $u = \dfrac{v}{\|v\|}$;

iv. $Q_1 = I_m - 2uu^T$;

Passo 2: Determine A_2 e A_2' tal que:

$$A_2 = Q_1 A_1 = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \star & \dots & \star \\ 0 & & & \\ \vdots & & A_2' & \\ 0 & & & \end{bmatrix}$$

Passo 3: Para $k = 2, \ldots, n-1$,

- Repita o Passo 1 para A'_k, obtenha o α_k e a matriz de Householder Q'_k. Desde que a ordem de Q'_k é menor que a ordem de Q_1, fazemos:

$$Q_k = \begin{bmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & Q'_k \end{bmatrix}$$

- Repita o Passo 2 para obter A_{k+1} e A'_{k+1} tal que:

$$A_{k+1} = Q_k A_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \star & \star & \star & \ldots & \star \\ 0 & \alpha_2 & \star & \star & \ldots & \star \\ \vdots & \ddots & \ddots & \star & \ldots & \star \\ 0 & & 0 & \alpha_k & \ldots & \star \\ \vdots & & \vdots & \vdots & A'_{k+1} & \\ 0 & \ldots & 0 & 0 & & \end{bmatrix}.$$

Passo 4: Para $k = n$, faça

- Repita o Passo 1 para A'_n, obtenha o α_n e a matriz de Householder Q'_n. Desde que a ordem de Q'_n é menor que a ordem de Q_1, fazemos:

$$Q_n = \begin{bmatrix} I_{n-1} & 0 \\ 0 & Q'_k \end{bmatrix}$$

- Obtenha A_{n+1} tal que:

$$A_{n+1} = Q_n A_n = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \star & \dots & \star \\ 0 & \alpha_2 & \dots & \star \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \alpha_n \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

Depois de aplicar este algoritmo, temos que

$$R = Q_n \cdots Q_2 Q_1 A$$

e

$$Q = Q_1^T Q_2^T \cdots Q_n^T = Q_1 Q_2 \cdots Q_n$$

é uma matriz ortogonal. Assim,

$A = QR$ é decomposição QR completa de A.

Exemplo: Seja $A = \begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 3 & 5 \\ 0 & -\dfrac{1}{2} \end{bmatrix}$, determinemos a decomposição QR completa e reduzida, usando o Algoritmo HH, com 6 dígitos de precisão. **Solução:** Passo 0: Desde que a ordem de A é 3×2, então $m = 3$, $n = 2$, e

$$A_1 = \begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 3 & 5 \\ 0 & -\dfrac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Passo 1: Para $x = A_1(:, 1) = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix}$, temos que $e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\alpha_1 = \|x\|_2 = 5, \quad v = x - \alpha_1 e_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$u = \frac{v}{\|v\|} = \begin{bmatrix} -0.316228 \\ 0.948683 \\ 0 \end{bmatrix} \quad Q_1 = I_3 - 2uu^T = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.6 & 0 \\ 0.6 & -0.8 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Passo 2: Determinemos A_2 e A_2':

$$A_2 = Q_1 A_1 = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 0 & -1 \\ 0 & -0.5 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad A_2' = \begin{bmatrix} -1 \\ -0.5 \end{bmatrix}$$

Passo 3: Desde que $n = 2$, $n - 1 = 1$ então vamos para o Passo 4.
Passo 4: Ou seja, vamos a repetir o Passo 1 para A_2'.

- Para $x = A_2'(:, 1) = \begin{bmatrix} -1 \\ -0.5 \end{bmatrix}$, temos que $e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\alpha_2 = \|x\|_2 = 1.11803, \quad v = x - \alpha_2 e_1 = \begin{bmatrix} -2.11803 \\ -0.5 \end{bmatrix}, \quad u = \frac{v}{\|v\|} = \begin{bmatrix} -0.973249 \\ -0.229753 \end{bmatrix}$$

$$Q_2' = I_2 - 2uu^T = \begin{bmatrix} -0.894427 & -0.447214 \\ -0.447214 & 0.894427 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.894427 & -0.447214 \\ 0 & -0.447214 & 0.894427 \end{bmatrix}$$

- Determinemos A_3:

$$A_3 = Q_2 A_2 = \begin{bmatrix} 5. & 7. \\ 0 & 1.11803 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Logo,

- A decomposição QR completa de A é

$$R = \begin{bmatrix} 5. & 7. \\ 0 & 1.11803 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad Q = Q_1 Q_2 = \begin{bmatrix} 0.8 & -0.536656 & -0.268328 \\ 0.6 & 0.715542 & 0.357771 \\ 0 & -0.447214 & 0.894427 \end{bmatrix}$$

- A decomposição QR reduzida de A é

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 0 & 1.11803 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{Q} = \begin{bmatrix} 0.8 & -0.536656 \\ 0.6 & 0.715542 \\ 0 & -0.447214 \end{bmatrix}$$

Exemplo: Seja

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 2 \end{bmatrix},$$

determinemos a decomposição QR completa e reduzida, usando o Algoritmo HH, com 6 dígitos de precisão.

Solução: Passo 0: Desde que a ordem de A é 4×3, então $m = 4$, $n = 3$, e

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Passo 1: Para $x = A_1(:,1) = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$, temos que $e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\alpha_1 = \|x\|_2 = 2.64575, \quad v = x - \alpha_1 e_1 = \begin{bmatrix} -1.64575 \\ 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix},$$

$$u = \frac{v}{\|v\|} = \begin{bmatrix} -0.55769 \\ 0.677733 \\ 0.338866 \\ -0.338866 \end{bmatrix}$$

$$Q_1 = I_4 - 2uu^T = \begin{bmatrix} 0.377964 & 0.755929 & 0.377964 & -0.377964 \\ 0.755929 & 0.081357 & -0.459321 & 0.459321 \\ 0.377964 & -0.459321 & 0.770339 & 0.229661 \\ -0.377964 & 0.459321 & 0.229661 & 0.770339 \end{bmatrix}$$

Passo 2: Determinemos A_2 e A_2':

$$A_2 = Q_1 A_1 = \begin{bmatrix} 2.64575 & -1.88982 & 0. \\ 0 & -1.13389 & 1.21525 \\ 0 & -1.06695 & 1.60763 \\ 0 & 0.0669467 & 1.39237 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad A_2' = \begin{bmatrix} -1.13389 & 1.21525 \\ -1.06695 & 1.60763 \\ 0.0669467 & 1.39237 \end{bmatrix}$$

Passo 3: Desde que $n = 3$, $n - 1 = 2$ então vamos a repetir os Passos 1 e 2 para A_2'.

- Para $x = A_2'(:, 1) = \begin{bmatrix} -1.13389 \\ -1.06695 \\ 0.0669467 \end{bmatrix}$, temos que $e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\alpha_2 = \|x\|_2 = 1.55839, \quad v = x - \alpha_2 e_1 = \begin{bmatrix} -2.69228 \\ -1.06695 \\ 0.0669467 \end{bmatrix},$$

$$u = \frac{v}{\|v\|} = \begin{bmatrix} -0.92941 \\ -0.368324 \\ 0.0231109 \end{bmatrix}$$

$$Q_2' = \begin{bmatrix} -0.727607 & -0.684648 & 0.042959 \\ -0.684648 & 0.728675 & 0.0170246 \\ 0.042959 & 0.0170246 & 0.998932 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.727607 & -0.684648 & 0.042959 \\ 0 & -0.684648 & 0.728675 & 0.0170246 \\ 0 & 0.042959 & 0.0170246 & 0.998932 \end{bmatrix}$$

- Determinemos A_3 e A_3' :

$$A_3 = Q_2 A_2 = \begin{bmatrix} 2.64575 & -1.88982 & 0. \\ 0 & 1.55839 & -1.92507 \\ 0 & 0 & 0.363122 \\ 0 & 0 & 1.47046 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad A_3' = \begin{bmatrix} 0.363122 \\ 1.47046 \end{bmatrix}.$$

Passo 4: Agora $k = 3$, ou seja, vamos a repetir o Passo 1 para A_2'.

- Para $x = A_3'(:, 1) = \begin{bmatrix} 0.363122 \\ 1.47046 \end{bmatrix}$, temos que $e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\alpha_3 = \|x\|_2 = 1.51463, \quad v = x - \alpha_2 e_1 = \begin{bmatrix} -1.15151 \\ 1.47046 \end{bmatrix},$$

$$u = \frac{v}{\|v\|} = \begin{bmatrix} -0.616546 \\ 0.787319 \end{bmatrix}$$

$$Q_3' = \begin{bmatrix} 0.239743 & 0.970836 \\ 0.970836 & -0.239743 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad Q_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.239743 & 0.970836 \\ 0 & 0 & 0.970836 & -0.239743 \end{bmatrix}$$

- Determinemos A_4 :

$$A_4 = Q_3 A_3 = \begin{bmatrix} 2.64575 & -1.88982 & 0. \\ 0 & 1.55839 & -1.92507 \\ 0 & 0 & 1.51463 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Logo,

- A decomposição QR completa de A é

$$R = \begin{bmatrix} 2.64575 & -1.88982 & 0. \\ 0 & 1.55839 & -1.92507 \\ 0 & 0 & 1.51463 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e}$$

$$Q = Q_1 Q_2 Q_3 = \begin{bmatrix} 0.377964 & -0.825029 & -0.388368 & -0.160128 \\ 0.755929 & 0.27501 & 0.349531 & -0.480384 \\ 0.377964 & -0.18334 & 0.427205 & 0.800641 \\ -0.377964 & -0.458349 & 0.737899 & -0.320256 \end{bmatrix}$$

- A decomposição QR reduzida de A é

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 2.64575 & -1.88982 & 0. \\ 0 & 1.55839 & -1.92507 \\ 0 & 0 & 1.51463 \end{bmatrix} \quad \text{e}$$

$$\hat{Q} = \begin{bmatrix} 0.377964 & -0.825029 & -0.388368 \\ 0.755929 & 0.27501 & 0.349531 \\ 0.377964 & -0.18334 & 0.427205 \\ -0.377964 & -0.458349 & 0.737899 \end{bmatrix}$$

Embora, a decomposição QR completa nos forneça a decomposição QR reduzida, muitas vezes só é necessária a decomposição QR reduzida.

Assim, existem vários métodos para obter esta decomposição, entre eles temos:

- Ortogonalização de Gram-Schmidt;
- Ortogonalização de Gram-Schmidt Modificado.

- Como a ortogonalização de Gram-Schmidt tem propriedades numéricas muito fracas uma vez que os w_i perdem precisão no que diz respeito à ortogonalidade.

- Vamos a trabalhar somente com a ortogonalização Gram-Schimdt Modificado.

Algoritmo GS Modificado: Dada uma matriz A, de ordem $m \times n$, com $\operatorname{posto}(A) = n$.

Para $k = 1, 2, \ldots, n$, faça:

$$u_k = A(:, k)$$

Para $k = 1, 2, \ldots, n$, faça:

$$r_{kk} \quad \leftarrow \quad \|u_k\|_2 \quad \text{e} \quad w_k \quad \leftarrow \quad \frac{u_k}{r_{kk}}$$

Para $j = k + 1, \ldots, n$, faça:

$$\begin{aligned} r_{kj} &\leftarrow w_k^T u_j \\ u_j &\leftarrow u_j - r_{kj} w_k \\ j &\leftarrow j + 1 \end{aligned}$$

$k \leftarrow k + 1$;

Então, depois de aplicar o Algoritmo GS Modificado, fazemos

$$\hat{Q} = \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & \ldots & w_n \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{R} = [r_{ij}]$$

Exemplo: Seja

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 3 & 5 \\ 0 & -\dfrac{1}{2} \end{bmatrix},$$

determinemos a decomposição QR reduzida, usando o Algoritmo GS modificado, com 6 dígitos de precisão.

Solução: Da definição de A temos que $m = 3$, $n = 2$ e as suas colunas são:

$$A(:,1) = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad A(:,2) = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \\ -\dfrac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Assim, aplicando o algoritmo GS Modificado para este vetores temos:

$$k = 1, 2.$$

Para $k = 1, 2$ faça:

$$u_k = A(:, k)$$

Ou seja,

$$u_1 = A(:, 1) \quad \Rightarrow \quad u_1 = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$u_2 = A(:, 2) \quad \Rightarrow \quad u_2 = \begin{bmatrix} 5 \\ 5 \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Para $k = 1$ **faça:**

$$\begin{aligned} r_{11} \quad &\leftarrow \quad \|u_1\|_2 = 5 \\ w_1 \quad &\leftarrow \quad \frac{u_1}{r_{11}} = \begin{bmatrix} 0.8 \\ 0.6 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Para $j = 2$ **faça:**

$$r_{1j} \quad \leftarrow \quad w_1^T u_j \quad \text{e} \quad u_j \quad \leftarrow \quad u_j - r_{1j} w_1$$

Ou seja: **Para** $j = 2$ **temos:**

$$r_{12} \quad \leftarrow \quad w_1^T u_2 = 7 \quad \text{e} \quad u_2 \quad \leftarrow \quad u_2 - r_{12} w_1 = \begin{bmatrix} -0.6 \\ 0.8 \\ -0.5 \end{bmatrix}$$

$k \leftarrow 1 + 1 = 2$

Valores atuais:

$$r_{11} = 5 \quad \text{e} \quad r_{12} = 7$$

$$u_1 = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad u_2 = \begin{bmatrix} -0.6 \\ 0.8 \\ -0.5 \end{bmatrix}, \quad w_1 = \begin{bmatrix} 0.8 \\ 0.6 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Para $k = 2$ faça:

$$\begin{aligned} r_{22} &\leftarrow \|u_2\|_2 = 1.11803 \\ w_2 &\leftarrow \frac{u_2}{r_{22}} = \begin{bmatrix} -0.536656 \\ 0.715542 \\ -0.447214 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Valores atuais:

$$r_{11} = 5, \quad r_{12} = 7, \quad \text{e} \quad r_{22} = 1.11803$$

$$u_1 = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad u_2 = \begin{bmatrix} -0.6 \\ 0.8 \\ -0.5 \end{bmatrix}$$

$$w_1 = \begin{bmatrix} 0.8 \\ 0.6 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad w_2 = \begin{bmatrix} -0.536656 \\ 0.715542 \\ -0.447214 \end{bmatrix}$$

Assim, a decomposição QR reduzida de A é

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 0 & 1.11803 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{Q} = \begin{bmatrix} 0.8 & -0.536656 \\ 0.6 & 0.715542 \\ 0 & -0.447214 \end{bmatrix}$$

Exemplo: Seja

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 2 \end{bmatrix},$$

determinemos a decomposição QR reduzida, usando o Algoritmo GS modificado, com 6 dígitos de precisão.

Solução: Da definição de A temos que $m = 4$, $n = 3$ e as suas colunas são:

$$A(:,1) = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad A(:,2) = \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad A(:,3) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Assim, aplicando o algoritmo GS Modificado para este vetores temos:

$$k = 1, 2, 3.$$

Para $k = 1, 2, 3$ faça:

$$u_k = A(:, k)$$

Ou seja,

$$u_1 = A(:, 1) \quad \Rightarrow \quad u_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$u_2 = A(:, 2) \quad \Rightarrow \quad u_2 = \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$u_3 = A(:, 3) \quad \Rightarrow \quad u_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Para $k = 1$ faça:

$$r_{11} \quad \leftarrow \quad \|u_1\|_2 = 2.64575 \qquad w_1 \quad \leftarrow \quad \frac{u_1}{r_{11}} = \begin{bmatrix} 0.377964 \\ 0.755929 \\ 0.377964 \\ -0.377964 \end{bmatrix}$$

Para $j = 2, 3$ faça:

$$r_{1j} \quad \leftarrow \quad w_1^T u_j \quad \text{e} \quad u_j \quad \leftarrow \quad u_j - r_{1j} w_1$$

Ou seja: **Para $j = 2$ temos:**

$$r_{12} \quad \leftarrow \quad w_1^T u_2 = -1.88982 \quad \text{e} \quad u_2 \quad \leftarrow \quad u_2 - r_{12} w_1 = \begin{bmatrix} -1.28571 \\ 0.428571 \\ -0.285714 \\ -0.714286 \end{bmatrix}$$

Para $j = 3$ temos:

$$r_{13} \quad \leftarrow \quad w_1^T u_3 = 0 \quad \text{e} \quad u_3 \quad \leftarrow \quad u_3 - r_{13} w_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$k \leftarrow 1 + 1 = 2$$

Valores atuais:

$$r_{11} = 2.64575, \quad r_{12} = -1.88982 \quad \text{e} \quad r_{13} = 0$$

$$u_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad u_2 = \begin{bmatrix} -1.28571 \\ 0.428571 \\ -0.285714 \\ -0.714286 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad u_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$w_1 = \begin{bmatrix} 0.377964 \\ 0.755929 \\ 0.377964 \\ -0.377964 \end{bmatrix}$$

Para $k = 2$ faça:

$$r_{22} \quad \leftarrow \quad \|u_2\|_2 = 1.55839 \qquad w_2 \quad \leftarrow \quad \frac{u_2}{r_{22}} = \begin{bmatrix} -0.825029 \\ 0.27501 \\ -0.18334 \\ -0.458349 \end{bmatrix}$$

Para $j = 3$ faça:

$$r_{2j} \quad \leftarrow \quad w_2^T u_j \quad \text{e} \quad u_j \quad \leftarrow \quad u_j - r_{2j} w_2$$

Ou seja: **Para $j = 3$ temos:**

$$r_{23} \quad \leftarrow \quad w_2^T u_3 = -1.92507 \quad \text{e} \quad u_3 \quad \leftarrow \quad u_3 - r_{23} w_2 = \begin{bmatrix} -0.588235 \\ 0.529412 \\ 0.647059 \\ 1.11765 \end{bmatrix}$$

$$k \leftarrow 2 + 1 = 3$$

Valores atuais:

$r_{11} = 2.64575, \quad r_{12} = -1.88982, \quad r_{13} = 0, \quad r_{22} = 1.55839$ e $r_{23} = -1.92507$

$$u_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad u_2 = \begin{bmatrix} -1.28571 \\ 0.428571 \\ -0.285714 \\ -0.714286 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad u_3 = \begin{bmatrix} -0.588235 \\ 0.529412 \\ 0.647059 \\ 1.11765 \end{bmatrix}$$

$$w_1 = \begin{bmatrix} 0.377964 \\ 0.755929 \\ 0.377964 \\ -0.377964 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad w_2 = \begin{bmatrix} -0.825029 \\ 0.27501 \\ -0.18334 \\ -0.458349 \end{bmatrix}$$

Para $k=3$ faça:

$$r_{33} \quad \leftarrow \quad \|u_3\|_2 = 1.51463 \qquad w_3 \quad \leftarrow \quad \frac{u_3}{r_{33}} = \begin{bmatrix} -0.388368 \\ 0.349531 \\ 0.427205 \\ 0.737899 \end{bmatrix}$$

Valores atuais:

$$r_{11} = 2.64575, \quad r_{12} = -1.88982, \quad r_{13} = 0, \quad r_{22} = 1.55839$$

$$r_{23} = -1.92507 \quad \text{e} \quad r_{33} = 1.51463$$

$$u_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad u_2 = \begin{bmatrix} -1.28571 \\ 0.428571 \\ -0.285714 \\ -0.714286 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad u_3 = \begin{bmatrix} -0.588235 \\ 0.529412 \\ 0.647059 \\ 1.11765 \end{bmatrix}$$

$$w_1 = \begin{bmatrix} 0.377964 \\ 0.755929 \\ 0.377964 \\ -0.377964 \end{bmatrix}, \quad w_2 = \begin{bmatrix} -0.825029 \\ 0.27501 \\ -0.18334 \\ -0.458349 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad w_3 = \begin{bmatrix} -0.388368 \\ 0.349531 \\ 0.427205 \\ 0.737899 \end{bmatrix}$$

Assim, a decomposição QR reduzida de A é

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 2.64575 & -1.88982 & 0. \\ 0 & 1.55839 & -1.92507 \\ 0 & 0 & 1.51463 \end{bmatrix} \quad \text{e}$$

$$\hat{Q} = \begin{bmatrix} 0.377964 & -0.825029 & -0.388368 \\ 0.755929 & 0.27501 & 0.349531 \\ 0.377964 & -0.18334 & 0.427205 \\ -0.377964 & -0.458349 & 0.737899 \end{bmatrix}$$

PMQ e Decomposição QR

As equações normais do sistema original são

$$A^T A x = A^T b$$

Então, substituindo A pela sua decomposição QR reduzida, obtém-se um sistema equivalente, envolvendo apenas a matriz $\hat{R}$, isto é:

$$\begin{array}{rcl} A^T A x & = & A^T b \\ & \Leftrightarrow & \\ (\hat{Q}\hat{R})^T (\hat{Q}\hat{R}) x & = & (\hat{Q}\hat{R})^T b \\ & \Leftrightarrow & \\ \hat{R}^T (\hat{Q}^T \hat{Q}) \hat{R} x & = & \hat{R}^T \hat{Q}^T b \\ & \Leftrightarrow & \\ \hat{R}^T \hat{R} x & = & \hat{R}^T \hat{b} \end{array}$$

com $\hat{b} = \hat{Q}^T b$.

Se $\mathrm{posto}(A) = n$, então a matriz triangular $\hat{R}$ é não singular (os seus elementos diagonais são diferentes de zero). Logo

$$\begin{aligned}(\hat{R}^T)^{-1}\hat{R}^T\hat{R}x &= (\hat{R}^T)^{-1}\hat{R}^T\hat{b}\\ \hat{R}x &= \hat{b}\end{aligned}$$

Nesta situação, temos as seguinte equivalência:

$$A^TAx = A^Tb \quad \Leftrightarrow \quad \hat{R}x = \hat{b}.$$

Algoritmo PMQ via QR:

Dada a matriz A de ordem $m \times n$, com posto n, e $b \in \mathbb{R}^m$.

Passo 1: Determinar a decomposição QR reduzida A, isto é

$$A = \hat{Q}\hat{R};$$

Passo 2: Construir o vetor $\hat{b} = Q^T b$;

Passo 3: Resolver em x o sistema triangular superior:

$$\hat{R}x = \hat{b}.$$

Exemplo: Usando o Algoritmo PMQ via QR determinemos a solução do seguinte PMQ:

$$\begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 3 & 5 \\ 0 & -\dfrac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

Solução: Como

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

Passo 1: Dos exemplos anteriores temos que a decomposição QR reduzida de A é:

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 0 & 1.11803 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{Q} = \begin{bmatrix} 0.8 & -0.536656 \\ 0.6 & 0.715542 \\ 0 & -0.447214 \end{bmatrix}$$

Passo 2: Construindo $\hat{b}$:

$$\hat{b} = \hat{Q}^T b = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.6 & 0 \\ -0.536656 & 0.715542 & -0.447214 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -3 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1.78885 \end{bmatrix}$$

Passo 3: resolvendo em x o sistema triangular superior

$$\begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 0 & 1.11803 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1.78885 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad x^* = \begin{bmatrix} 2.04 \\ -1.6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{51}{25} \\ -\frac{8}{5} \end{bmatrix}.$$

Portanto, $x^* = \begin{bmatrix} \frac{51}{25} \\ -\frac{8}{5} \end{bmatrix}$ é o vetor de $\mathbb{R}^2$ que minimiza o PMQ, com valor mínimo $\|Ax^* - b\|_2^2 = \dfrac{49}{5}$.

Exemplo: Usando o Algoritmo PMQ via QR determinemos a solução do seguinte PMQ:

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -7 \\ -2 \\ 7 \\ -2 \end{bmatrix}$$

Solução: Como

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 2 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Passo 1: Dos exemplos anteriores temos que a decomposição QR reduzida de A é:

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 2.64575 & -1.88982 & 0. \\ 0 & 1.55839 & -1.92507 \\ 0 & 0 & 1.51463 \end{bmatrix} \quad \text{e}$$

$$\hat{Q} = \begin{bmatrix} 0.377964 & -0.825029 & -0.388368 \\ 0.755929 & 0.27501 & 0.349531 \\ 0.377964 & -0.18334 & 0.427205 \\ -0.377964 & -0.458349 & 0.737899 \end{bmatrix}$$

Passo 2: Construindo $\hat{b}$:

$$
\begin{aligned}
\hat{b} &= \hat{Q}^T b \\
&= \begin{bmatrix} 0.377964 & 0.755929 & 0.377964 & -0.377964 \\ -0.825029 & 0.27501 & -0.18334 & -0.458349 \\ -0.388368 & 0.349531 & 0.427205 & 0.737899 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -7 \\ -2 \\ 7 \\ -2 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} -0.755929 \\ 4.8585 \\ 3.53415 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

Passo 3: resolvendo em x o sistema triangular superior

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 2.64575 & -1.88982 & 0. \\ 0 & 1.55839 & -1.92507 \\ 0 & 0 & 1.51463 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ 2.33333 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad x^* = \begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ 2.33333 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ \frac{7}{3} \end{bmatrix}.$$

Portanto, $x^* = \begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ \frac{7}{3} \end{bmatrix}$ é o vetor de $\mathbb{R}^3$ que minimiza o PMQ, com valor mínimo $\|Ax^* - b\|_2^2 = \dfrac{208}{3}$.

Eficiência deste método

- O custo computacional assintótico do Algoritmo PMQ via QR, usando o algoritmo de Householder para fatoração QR, é da ordem

$$2mn^2 + \frac{2}{3}n^3$$

operações de ponto flutuante por segundo.

- Instabilidade numérica quando A próxima de ter deficiência de posto.

Bibliografia

1. Álgebra Linear e suas aplicações; Strang, G., Cengage Learning, 4° Edição, 2010.
2. Álgebra Linear; Poole, D., Thomson Learning, 2004.
3. Matrix Computations; Golub, G., Van Loan, C.F., Johns Hopkins University Press, 4° Edição, 2012.
4. Applied Numerical Linear Algebra; Demmel, J., SIAM, 1997.
5. Introduction to Applied Linear Algebra; Boyd, S., Vandenberghe, L., Cambridge University Press, 1° Edição, 2018.
6. Numerical Linear Algebra with Julia; Darve, E., Wootters, M., SIAM, 1° Edição, 2021.
7. Linear Algebra and Optimization for Machine Learning; Aggarwal, C. C., Springer, 1° Edição, 2020.
8. Algoritmos Numéricos; Campos, F.F. filho, LTC, 3 Edição, 2018.