Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica

MS512 Análise Numérica

Fundamentação Teórica Projeto Computacional I

Autores:
Marcos Cesar Manente Jr.
Miguel da Silva Araújo
Matheus Feres Turcheti

Campinas

Maio/2022

1 Item A

A fundamentação teórica para a implementação da decomposição de Cholesky para resolução de um sistema linear do formato $Ax = b$ nasce da necessidade de encontrar uma decomposição única para a matriz A.

O raciocínio se inicia levando em consideração que, para uma matriz $A_{n\times n}$ não-singular, existem duas matrizes L, U tais que $A = L \times U$. Essa decomposição LU, entretanto, não é única; de modo que surge o seguinte caminho lógico: seja $D : D_{ii} = U_{ii} \neq 0; i = 1 : n$ uma matriz diagonal para a qual vale que $D_{ii}^{-1} = {D_{ii}}^{-1} = \frac{1}{D_{ii}} = \frac{1}{U_{ii}}$.

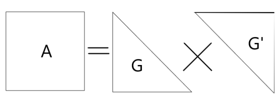
Nesse caso, vale que $LU = LDD^{-1}U = LD\bar{U}$, com $\bar{U}$ sendo uma matriz triangular superior unitária. Essa decomposição, chamada LDU, é única.

Considerando ainda o caso especial em que a matriz A é simétrica, vale que: $A = LDU \wedge A = A^t \Rightarrow LDU = (LDU)^t = U^tDL^t \Rightarrow L = U^t \wedge U = L^t \Rightarrow A = LDL^t$.

Quando A é dita definida positiva, A *d.p.* $\Rightarrow x^tAx > 0\ \forall\{x \in \mathbb{R}^n : x \neq 0\} \Rightarrow x^tLDL^tx > 0 \Rightarrow z^tDz > 0$ em que $z^tDz = 0 \Leftrightarrow z = 0$. Contudo, $\exists\ x : z = e_i$ e, nesse caso, podemos escrever: $e_i^tDe_i = D_{ii}$ e, como a matriz é definida positiva, temos que $x^tLDL^tx > 0 \Rightarrow D_{ii} > 0$.

O caminho lógico segue quando consideramos uma matriz $D^{\frac{1}{2}} : D_{ii}^{\frac{1}{2}} = (D_{ii})^{\frac{1}{2}} \Rightarrow D^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}} = D$, que nos leva, finalmente a:
Seja $A_{n\times n} : A = A^t \wedge x^tAx > 0\ \forall\{x \in \mathbb{R}^n : x \neq 0\}$, podemos escrever $A = LDL^t = LD^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}L^t = GG^t$; $G = LD^{\frac{1}{2}}$. G é uma matriz triangular inferior e é chamado o fator de Cholesky de A.

é uma boa representação visual da decomposição de Cholesky para A.



Mesmo visualmente é possível observar que faz sentido que $A_{11} = G_{11}G_{11}^t = (G_{11})^2 \Rightarrow G_{11} = \sqrt{A_{11}}$.

Por um processo análogo, segue que:

- $A_{kk} = G_{k1}G_{k1} + ... + G_{kk}G_{kk} \Rightarrow G_{kk} = (A_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1}(G_{kj})^2)^{\frac{1}{2}} k = 1 : n$

- $A_{ik} = G_{i1}G_{k1} + ... + G_{ik}G_{kk} \Rightarrow G_{ik} = \sum_{j=1}^{k-1} G_{ij}G_{kj}; k = 1 : n\ ; i = (k+1) : n$

Aplicar a decomposição de Cholesky é uma forma muito simples de checar se uma matriz é positiva definida. Isso ocorre porque, se $G_{kk} \leq 0$ para algum valor de k, a matriz à qual se associa o fator de Cholesky G não é positiva.

Dessa forma, um teste para a positividade definida de uma matriz pode consistir em simplesmente verificar o número r de elementos $G_{kk} \leq 0$, criando a condição *se* $r =$

$0,\ A\ p.d.$.

Finalmente, a implementação da decomposição de Cholesky para resolver um sistema linear $Ax = b$ segue da seguinte forma:

Seja $A \in \mathbb{R}^{n\times n}|\ A^t = A \wedge x^tAx > 0\ \forall\{x \in \mathbb{R}^n|x \neq 0\}$, podemos escrever $Ax = b \Rightarrow GG^tx = b$, em que G é o fator de Cholesky de A. $GG^tx = b \Rightarrow Gy = b$, que tem forma simples, pois a matriz G é triangular inferior. Basta resolver com relação a y e usar essa solução para determinar x baseando-se em $G^tx = y$.

2 Item B

O problema de quadrados mínimos consiste na necessidade de se minimizar a soma de quadrados dos resíduos de algum conjunto de dados de interesse que tenha sido fornecido. Para entender melhor, suponha que há um conjunto de dados que podem ser interpretados como pontos do tipo (t_i, y_i) e seja necessário encontrar uma função $p(t_i)$ que seja mais adequada para descrever-los, portanto, é necessário minimizar os erros do tipo $r_i = y_i - p(t_i)$, sendo o vetor $\boldsymbol{r}$ constituído por todos os n erros calculados.

Com isso, é necessário então que seja encontrada uma forma de minimizar:

$$||r||_2 = (\sum_{i=1}^{n} |y_i - p(t_i)|^2)^{1/2}$$

sendo equivalente a minimizar $||r||_2^2$:

$$||r||_2^2 = \sum_{i=1}^{n} |y_i - p(t_i)|^2$$

No entanto, é importante lembrar de que muitas vezes a função $p(t_i)$ mais adequada é um polinômio de grau *m - 1* e com isso temos que o conjunto de polinômios de grau $\leq m - 1$ compõe um espaço vetorial de tamanho m, cujas bases são dadas por $\phi_1...\phi_m$ (sendo $\phi_1(t) = 1, \phi_2(t) = t, \phi_3(t) = t^2, ..., \phi_m(t) = t^{m-1}$). Nesse caso, cada um dos polinômios nesse espaço pode ser descrito como:

$$p(t) = \sum_{j=1}^{m} x_j\phi_j(t)$$

em que $x_1...x_m$ são coeficientes escolhidos de maneira adequada. Portanto, o caso ideal seria dado por:

$$y_i = \sum_{j=1}^{m} x_j\phi_j(t_i)$$

É possível observar então que são obtidas n equações que possuem m coeficientes desconhecidos, ou seja, é obtido um sistema do tipo $A_{n_x m} x_{m_x 1} = b_{n_x 1}$:

$$\begin{bmatrix} \phi_1(t_1) & \phi_2(t_1) & ... & \phi_m(t_1) \\ \phi_1(t_2) & \phi_2(t_2) & ... & \phi_m(t_2) \\ ... & ... & ... & ... \\ \phi_1(t_n) & \phi_2(t_n) & ... & \phi_m(t_n) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ ... \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ ... \\ y_m \end{bmatrix}$$

Portanto, o problema de mínimos quadrados tem como objetivo encontrar $\mathbf{x}$ tal que ele minimize o vetor de resíduos $\mathbf{r}$, que é dado por $r = b - Ax$ (em sua notação utilizando matricial), ou ainda melhor, encontrar $\mathbf{x}$ tal que $||r||_2 = ||b - Ax||$ seja minimizado.

Para resolver isso, considere $Q_{n_x n}$ uma matriz ortogonal e considere também o seguinte sistema transformado $Q^T Ax = Q^T b$ e considere também $\mathbf{s}$ como sendo o vetor dos resíduos do sistema transformado. Logo, é encontrado que $s = Q^T b - Q^T Ax = Q^T(b - Ax) = Q^T r$, mas como Q^T é uma matriz ortogonal, observa-se a equivalência de $||s||_2 = ||r||_2$. Então é possível dizer que tanto o sistema original quanto o sistema modificado possuem a mesma solução para o problema de mínimos quadrados.

Por conta disso, é necessário encontrar Q tal que essa seja uma matriz ortogonal simples para o sistema transformado. Para isso se faz necessário o uso da decomposição QR, a qual indica que uma matriz A pode ser decomposta da seguinte forma $A = QR$, em que dada uma matriz $A_{n_x m}$ (com $n > m$), existe uma matriz $Q_{n_x n}$ e $R_{n_x m}$ tal que Q seja ortogonal e $R = \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix}$ com $\hat{R}_{m_x m}$ sendo uma matriz triangular superior. Dessa forma, é possível realizar a decomposição QR na matriz A, mesmo com ela não sendo uma matriz quadrada.

Para prosseguir na solução do problema de mínimos quadrados, é necessário então considerar qual é o posto da matriz A. Começando pelo caso em que a matriz A tem posto igual a m, temos que o sistema do tipo $Ax = b$ pode ser decomposto da forma $Q^T Ax = Q^T b$, ou ainda $Rx = c$ (uma vez que $R = Q^T A$), em que $c = Q^T b$. É definido então $c = \begin{bmatrix} \hat{c} \\ d \end{bmatrix}$, com $\hat{c}$ sendo um vetor de tamanho m. Dessa forma, é possível definir o resíduo $s = c - Rx$ da seguinte forma:

$$s = \begin{bmatrix} \hat{c} \\ d \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} \hat{c} - \hat{R}x \\ d \end{bmatrix}$$

Consequentemente, é possível afirmar que:

$$||s||_2^2 = \sum_{i=1}^{n} |s_i|^2 = ||\hat{c} - \hat{R}x||_2^2 + ||d||_2^2$$

Com isso, observamos que como o termo $||d||_2^2$ não depende de $\mathbf{x}$, $||s||_2^2$ será minimizado quando $||\hat{c} - \hat{R}x||_2^2$ for minimizado. A partir disso, temos então que o problema de mínimos quadrados para o caso em que a matriz tem posto igual a m tem solução única e é dada através da resolução do sistema $\hat{R}x = \hat{c}$.

Agora passamos a considerar o caso em que a matriz A possui o seu posto sendo menor do que m, o qual se faz necessário utilizar uma variação da decomposição QR utilizada anteriormente, caso contrário a matriz $\hat{R}$ seria singular e não válida para a solução do problema. Para contornar tal problema é utililizada a decomposição QR com pivoteamento de colunas. Para isso, considere então que exista uma matriz A_{nxm} com posto dado por um valor $r > 0$ (com r sendo a quantidade de passos da decomposição QR com pivoteamento de colunas), então existe uma matriz $\hat{A}$ obtida atrvés da permutação de colunas da matriz A, uma matriz Q_{nxn} ortogonal e uma matriz $R_{nxm} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ e R_{11} sendo triangular superior e não singular, formando um sistema da forma $\hat{A} = QR$. A partir dessa decomposição é possível encontrar uma solução para o problema de mínimos quadrados que se encontra nesse caso.

Para encontrar a solução, consideremos o vetor $\hat{x}$ (de dimensão m), o qual é obtido de do vetor $\mathbf{x}$ ao realizar a mesma sequência de permutações realizadas para transformar a matriz A na matriz $\hat{A}$. Com isso, temos que $\hat{A}\hat{x} = Ax$ e que portanto o problema de minimizar $||b - Ax||_2$ é equivalente a minimizar $||b - \hat{A}\hat{x}||_2$. Do sistema $\hat{A}\hat{x} = b$ temos que $R\hat{x} = Q^T b = c$:

$$\begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x_1} \\ \hat{x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{c} \\ d \end{bmatrix}$$

sendo que a partir disso encontramos o resíduo da transformação, que é dado da seguinte forma:

$$||s||_2^2 = ||\hat{c} - R_{11}\hat{x}_{11} - R_{12}\hat{x}_{12}||_2^2 + ||d||_2^2$$

do qual segue que a solução do problema é dada ao encontrar $\hat{x}$ que minimize o termo $||\hat{c} - R_{11}\hat{x}_{11} - R_{12}\hat{x}_{12}||_2^2$

3 Implementação e Resultados Obtidos

Um resumo de como testar o código desenvolvido está descrito em README.md e os resultados obtidos podem ser visualizados separadamente na pasta *results*.

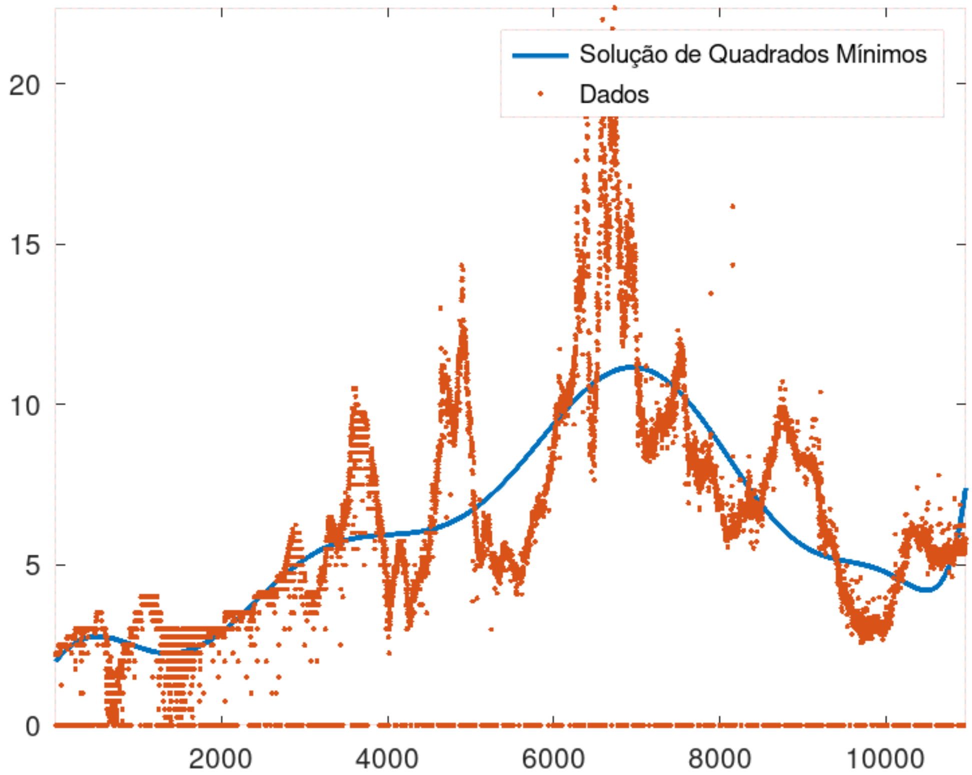
Em nossa implementação da decomposição de Cholesky fizemos a escolha de fatorar $A = R^t R$ sendo R triangular superior. Dessa forma a dedução dada em (1), em que $A = GG^t$ é equivalente, dado que $G = R^t$. Utilizamos tal implementação para construir uma função que resolve sistemas lineares da forma que foi descrito em (1), isto é, como $Ax = b \Rightarrow R^t Rx = b \Rightarrow R^t y = b$ com $y = Rx$. Como R^t é triangular inferior, utilizamos substituição *forward* em $R^t y = b$ e obtemos um vetor intermediário y, o qual forma um sistema linear $Rx = y$ que pode ser resolvido por substituição *backward*, uma vez que R é triangular superior.

Utilizamos tal implementação para ajustar os dados em fedfund-m.dat e fedfund-b.dat por um polinômio de grau 10. Primeiramente implementamos um algoritmo que resolve tal problema de quadrados mínimos utilizando a decomposição de Cholesky para resolver as equações normais $A^t Ax = A^t b$ em que $b \in \mathbb{R}^m$ é o vetor que contém os dados a serem ajustados e $A \in \mathbb{R}^{n \times 11}$ tem as suas colunas compostas por um vetor índice (i.e. um vetor ordenado de inteiros em $[1, m]$) elevado, elemento a elemento, por um inteiro entre 0 e 10 (as potências do polinômio da regressão).

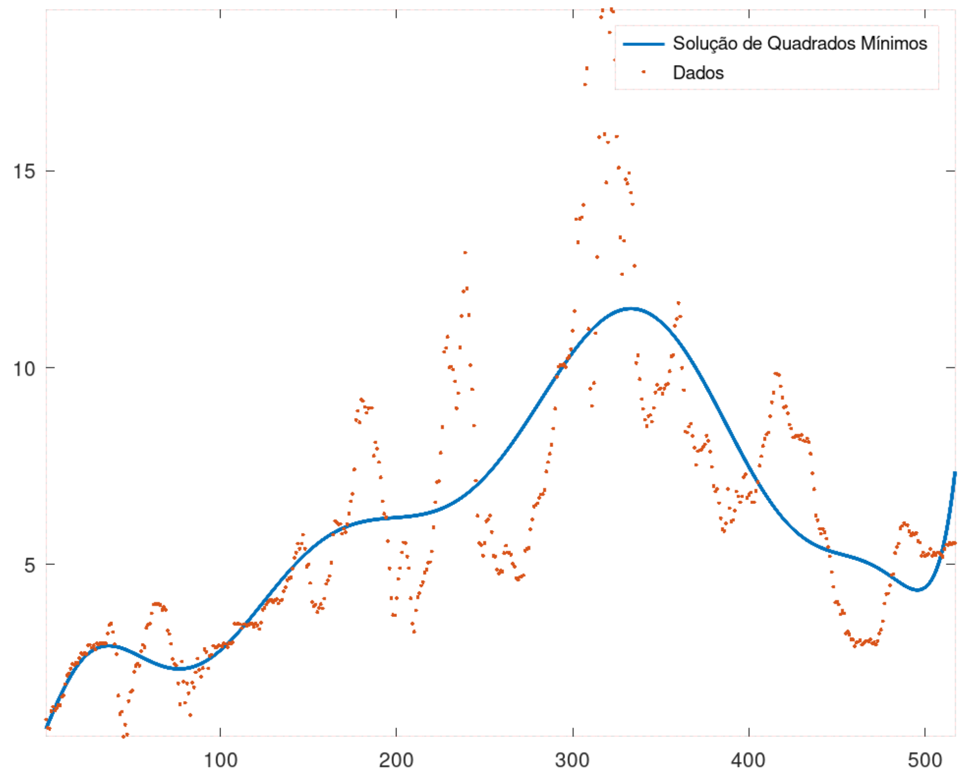
Notamos porém que a matriz A obtida é extremamente mal condicionada. Mesmo deslocando o vetor índice por $-\lfloor m/2 \rfloor$, a fim de reduzir o valor absoluto das potências em A, seu número de condição $k(A)$ permaneceu muito alto. Esse mal condicionamento refletiu em valores muito grandes para a solução de quadrados mínimos, de forma que não foi nem mesmo possível plotar o gráfico da função polinomial obtida.

Por outro lado, utilizando a decomposição QR do próprio Octave sobre a mesma matriz A, podemos calcular a solução de quadrados mínimos resolvendo, por substituição *backward*, o sistema linear $Rx = Q^t b$ sendo $A = Q\hat{R}$ com $\hat{R} = [R \;\; 0]^t$ (ou seja, R é quadrada triangular superior). Como a decomposição QR não sofre do problema de mal condicionamento, obtemos resultados bem mais satisfatórios.

Gráficos para os ajustes de fedfund-b.dat e fedfund-m.dat, respectivamente:



Solução de Quadrados Mínimos
Dados
0
5
10
15
20
2000
4000
6000
8000
10000



Solução de Quadrados Mínimos
Dados
5
10
15
100
200
300
400
500