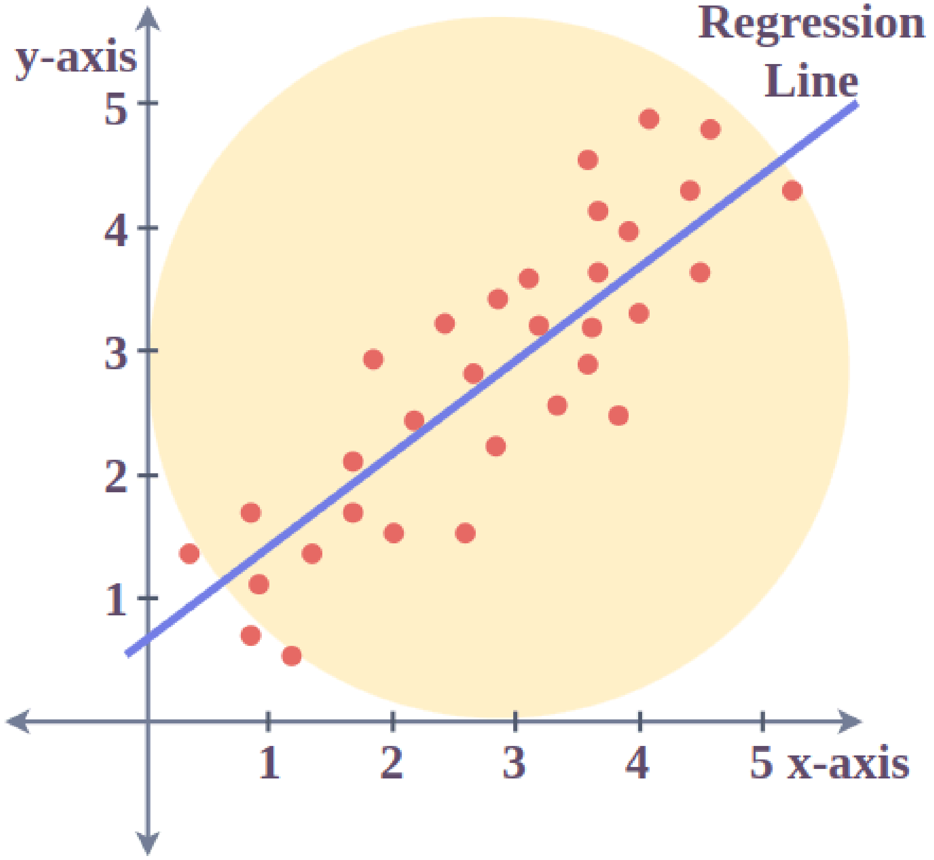
Mínimos Quadrados

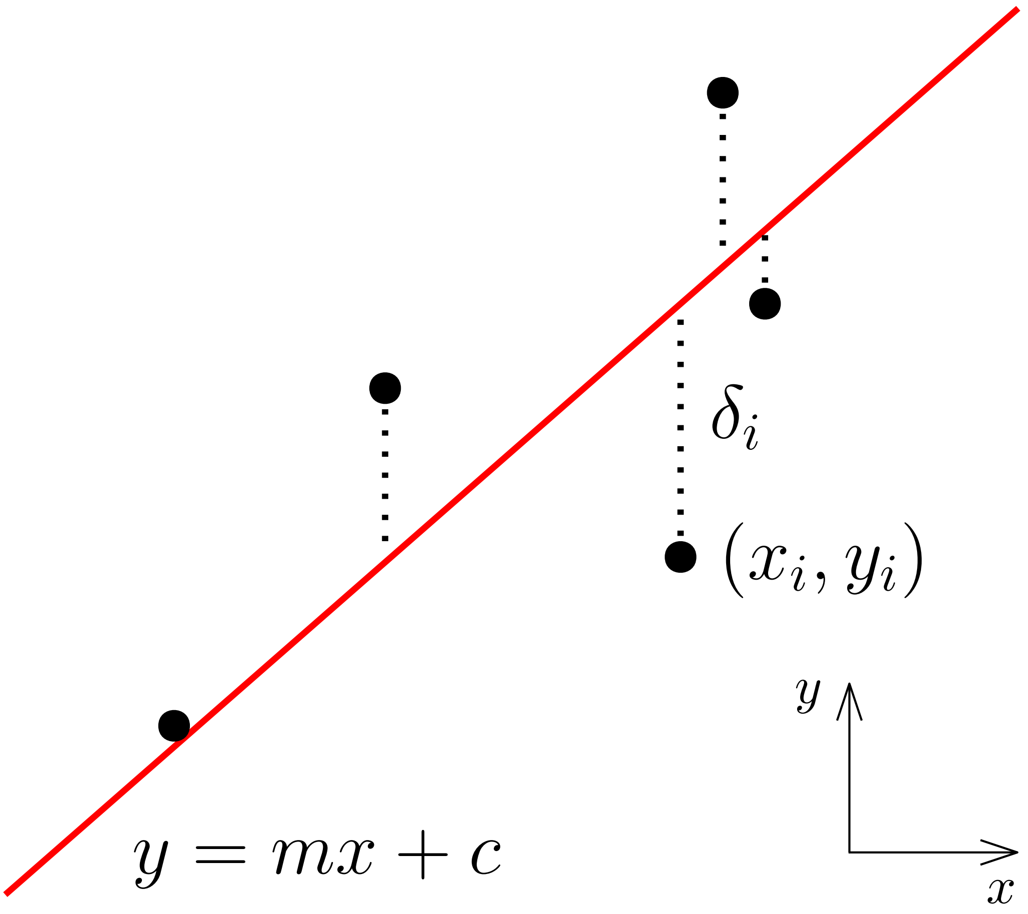
Decomposição QR

Conteúdo

Introdução ao Problema de Mínimos Quadrados Discreto

Dado um conjunto de pontos de dados discretos $\{(t_i, y_i)\}_{i=1}^{m}$, o objetivo do **problema de mínimos quadrados discreto** é encontrar um polinômio $p(t)$ de grau d que aproxime esses dados minimizando o erro residual.





Formulação Matemática

O polinômio $p(t)$ pode ser expresso como:

$$p(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + \cdots + a_d t^d$$

Os resíduos para cada ponto de dados são:

$$r_i = y_i - p(t_i), \quad \text{para } i = 1, 2, \ldots, m$$

O objetivo é minimizar a soma dos quadrados dos resíduos:

$$\min_{a_0, a_1, \ldots, a_d} \sum_{i=1}^{m} (y_i - p(t_i))^2$$

Representação Matricial

Podemos reescrever o problema em termos matriciais como:

$$\mathbf{V}\mathbf{a} \approx \mathbf{y}$$

onde $\mathbf{a}$ é o vetor de coeficientes do polinômio $p(t)$ e $\mathbf{V}$ é a matriz de Vandermonde.

Assim, temos:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \cdots & t_1^d \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \cdots & t_2^d \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & t_m & t_m^2 & \cdots & t_m^d \end{bmatrix}}_{\text{Matriz de Vandermonde}} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_d \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

Método dos Mínimos Quadrados

Dado um sistema sobredeterminado $A\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$:

- $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, m \gg n$ (mais equações do que incógnitas)
- Queremos minimizar o erro residual:

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

A solução é dada pelas **equações normais** [1]:

$$A^\top A\mathbf{x} = A^\top \mathbf{b},$$

que é um sistema linear de n equações e n incógnitas.

[1]: Pode se demonstrar que a solução das equações normais é o ponto de mínimo global do problema de mínimos quadrados.

Decomposição QR

Definição

A **decomposição QR** de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) é a fatoração de A em:

$$A = QR$$

onde:

- $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ é uma matriz ortogonal ($Q^\top Q = I$)
- $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é uma matriz triangular superior

Decomposição QR em Mínimos Quadrados

Substituindo $A = QR$ na equação dos mínimos quadrados:

$$QR\mathbf{x} \approx \mathbf{b}$$

Multiplicando ambos os lados por $Q^\top$:

$$Q^\top QR\mathbf{x} = R\mathbf{x} = Q^\top\mathbf{b}$$

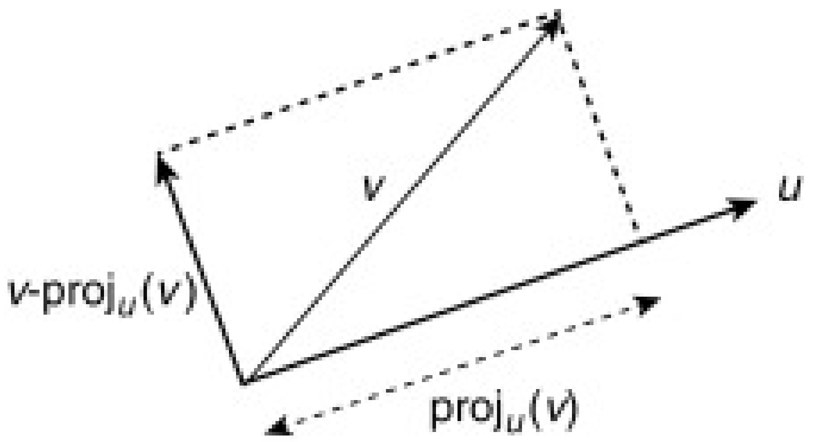
Como R é triangular superior, basta aplicarmos a substituição regressiva para encontrar a solução:

$$\mathbf{x} = R^{-1}Q^\top\mathbf{b}$$

Processo de Gram-Schmidt (GS)

É um **algoritmo para ortogonalização**, onde **a entrada** é um conjunto de **vetores linearmente independentes** e **a saída** são **vetores ortonormais** que geram o **mesmo subespaço** que os vetores de entrada.

É baseado em **sucessivas projeções ortogonais**.



Processo de Gram-Schmidt Clássico

Seja $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_n\}$ um conjunto LI.

A projeção de $\mathbf{v}$ sobre $\mathbf{u}$ é dada por:

$$\mathrm{proj}_{\mathbf{u}}(\mathbf{v}) = \frac{\mathbf{u}^\top \mathbf{v}}{\mathbf{u}^\top \mathbf{u}} \mathbf{u}$$

1. **Primeiro vetor ortonormal:**

$$\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{a}_1}{\|\mathbf{a}_1\|_2}$$

2. **Segundo vetor ortonormal:**

$$\mathbf{q}_2 = \frac{\mathbf{a}_2 - \mathrm{proj}_{\mathbf{q}_1}(\mathbf{a}_2)}{\|\mathbf{a}_2 - \mathrm{proj}_{\mathbf{q}_1}(\mathbf{a}_2)\|_2}$$

3. **Generalização para o k-ésimo vetor:**

$$\mathbf{q}_k = \frac{\mathbf{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1} (\mathbf{q}_j^\top \mathbf{a}_k) \mathbf{q}_j}{\|\mathbf{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1} (\mathbf{q}_j^\top \mathbf{a}_k) \mathbf{q}_j\|_2}$$

Processo de Gram-Schmidt Modificado

Diferença principal:

- No **Gram-Schmidt clássico**, projetamos e subtraímos simultaneamente.
- No **modificado**, projetamos e subtraímos **incrementalmente**, garantindo maior ortogonalidade.

Algoritmo: GS modificado

Para cada vetor $\mathbf{a}_k \in \mathbb{R}^m$:

1. Inicialize $\mathbf{r}_k = \mathbf{a}_k$.
2. Para cada vetor ortonormal anterior $\mathbf{q}_j$:

$$r_{jk} = \mathbf{q}_j^\top \mathbf{a}_k, \quad \mathbf{r}_k = \mathbf{r}_k - r_{jk}\mathbf{q}_j$$

3. Normalize:

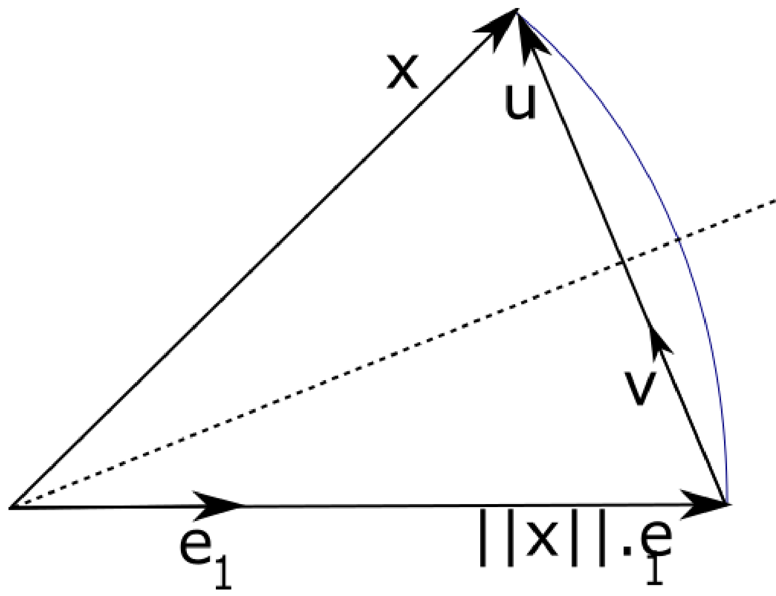
$$\mathbf{q}_k = \frac{\mathbf{r}_k}{\|\mathbf{r}_k\|_2}$$

6. Refletores de Householder

Definição

Um refletor de Householder é uma matriz ortogonal $H \in \mathbb{R}^{m \times m}$ que reflete um vetor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ em relação a um hiperplano ortogonal a um vetor $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$:

$$H = I - 2\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^\top}{\mathbf{v}^\top\mathbf{v}}$$



Propriedades:

- $H^\top H = I$ (ortogonalidade)
- $H = H^\top$ (simetria)

Proposição: A matriz de Householder é ortogonal

Precisamos mostrar que $H^T H = I$.

A matriz de Householder é definida como:

$$H = I - 2\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}}$$

onde $\mathbf{v}$ é um vetor.

Primeiro, observe que H é simétrica:

$$H^T = \left(I - 2\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}}\right)^T = I - 2\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} = H$$

Finalmente, calcule $H^T H$:

$$
\begin{aligned}
H^T H &= \left(I - 2\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} \right) \left(I - 2\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} \right) \\
&= I - 2\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} - 2\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} + 4\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{(\mathbf{v}^T\mathbf{v})^2} \\
&= I - 4\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} + 4\frac{\mathbf{v}(\mathbf{v}^T\mathbf{v})\mathbf{v}^T}{(\mathbf{v}^T\mathbf{v})^2} \\
&= I - 4\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} + 4\frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\mathbf{v}^T\mathbf{v}} = I
\end{aligned}
$$

7. Householder QR

As reflexões de Householder podem ser aplicadas na decomposição QR.

O processo envolve a construção iterativa de matrizes de Householder para introduzir zeros abaixo da diagonal principal, transformando A em R.

O produto dessas matrizes de Householder forma a matriz ortogonal Q.

$$\underbrace{H_n H_{n-1} \cdots H_1}_{\text{Matrizes de Householder}} \; A = R$$

Ideia Central

Suponha que desejamos refletir um vetor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ de modo que ele se alinhe com um múltiplo do primeiro vetor base padrão $\mathbf{e}_1 = [1, 0, 0, \ldots, 0]^T$.

1. **Calcule a norma de $\mathbf{x}$:**

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}$$

2. **Determine o escalar α:**

$$\alpha = -\operatorname{sign}(x_1) \cdot \|\mathbf{x}\|$$

3. **Construa o vetor $\mathbf{v}$:**

$$\mathbf{v} = \mathbf{x} - \alpha \mathbf{e}_1$$

4. **Normalize $\mathbf{v}$:**

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|}$$

- A matriz de Householder resultante é $H = I - 2\mathbf{v}\mathbf{v}^T$.
- $H\mathbf{x}$ é um vetor com zeros em todas as componentes, exceto a primeira.

Proposição: $Hx = \alpha e_1$

Sabendo que

$$Hx = x - 2\frac{v^T x}{v^T v} v \quad \text{e} \quad \alpha^2 = \|x\|^2,$$

vamos calcular $v^T x$ e $v^T v$:

$$\begin{aligned} v^T x &= (x - \alpha e_1)^T x \\ &= \|x\|^2 - \alpha x_1, \\ v^T v &= (x - \alpha e_1)^T (x - \alpha e_1) \\ &= \|x\|^2 - 2\alpha x_1 + \alpha^2 \\ &= \|x\|^2 - 2\alpha x_1 + \|x\|^2 \\ &= 2(\|x\|^2 - \alpha x_1). \end{aligned}$$

Agora, fazendo as substituições na expressão para Hx, temos:

$$
\begin{aligned}
Hx &= x - 2\frac{\|x\|^2 - \alpha x_1}{2(\|x\|^2 - \alpha x_1)}(x - \alpha e_1) \\
&= x - (x - \alpha e_1) \\
&= \alpha e_1
\end{aligned}
$$

Portanto, para $v = x - \operatorname{sign}(x_1)\|x\|e_1$, a matriz de Householder H satisfaz $Hx = \|x\|e_1$.

Ideia Central (continuação)

Para aplicar sucessivamente as reflexões de Householder e reduzir a matriz A a uma forma triangular superior, seguimos o seguinte procedimento:

1. Inicialmente, aplicamos a primeira reflexão de Householder H_1 à matriz completa A, zerando os elementos abaixo do primeiro elemento da primeira coluna. A matriz H_1 é da mesma dimensão de A.

$$H_1 A = \begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix}$$

Ideia Central (continuação)

2. Depois, excluímos a primeira linha e a primeira coluna de A e construímos a matriz de Householder H_2 para zerar os elementos abaixo do primeiro elemento dessa submatriz. Aplicamos

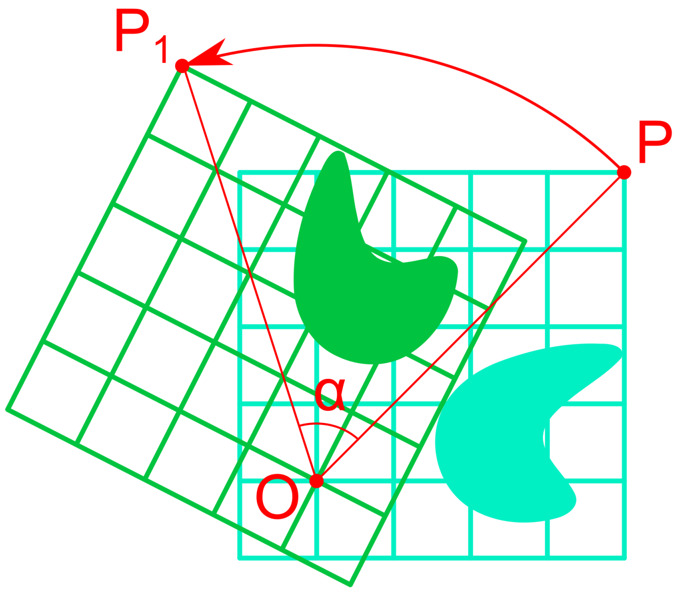
$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix}}_{H_2} H_1 A = \begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix}$$

3. Esse processo é repetido sucessivamente para submatrizes menores, até que todos os elementos abaixo da diagonal principal de A sejam zerados.

8. Rotações de Givens

Definição

Uma **rotação de Givens** é uma transformação ortogonal elementar que atua em um plano bidimensional específico de $\mathbb{R}^m$. A ideia é aplicar uma rotação em torno de um eixo de forma a anular (ou "zerar") um elemento específico de um vetor ou de uma coluna de uma matriz.



Por exemplo, para anular o elemento $(4,2)$ de uma matriz 5×5, podemos usar a matriz de rotação de Givens:

$$G(2,4,\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & -s & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & s & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

com $c = \cos(\theta)$ e $s = \sin(\theta)$ para um ângulo θ convenientemente escolhido.

Determinando θ

$$\begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{2,2} \\ a_{4,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \\ 0 \end{bmatrix}$$

com

$$r = \sqrt{a_{2,2}^2 + a_{4,2}^2}$$
$$c = \frac{a_{2,2}}{r} \quad \text{e} \quad s = -\frac{a_{4,2}}{r}$$

Com esta escolha mantemos a norma do vetor original e $c^2 + s^2 = 1$.

Forma Geral

$$G(i,j,\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & \cdots & 0 & -s & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & s & 0 & \cdots & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Propriedades

1. **Ortogonalidade**: $G^T G = I$.
2. **Determinante**: $\det(G) = 1$, pois é uma rotação (sem reflexão).
3. **Esparsidade**: Uma rotação de Givens difere da identidade apenas nas linhas e colunas i e j.

Aplicação na Decomposição QR

Para calcular a decomposição QR de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ via rotações de Givens:

1. **Percorre-se cada coluna** $k = 1, 2, \ldots, n$:
    - Para cada linha i da coluna k (abaixo da diagonal), aplica-se uma rotação de Givens para zerar $a_{i,k}$:
        a. Identifique o par (k, i) onde $k < i$.
        b. Compute θ (ou diretamente c e s) para anular $a_{i,k}$.
        c. Multiplique A por $G(i, k, \theta)$ pela **esquerda**.
2. **Acumula-se as rotações** $G_1, G_2, \ldots$ para formar a matriz ortogonal Q. Então:

$$G_p \cdots G_2 G_1 \, A = R \quad \Rightarrow \quad Q^T A = R,$$

onde $Q = (G_p \cdots G_2 G_1)^T$.

Comparação: Householder vs. Givens

- **Householder**
  - Boa para matrizes densas: cada refletor zera vários elementos simultaneamente em uma coluna.
  - Menos eficiente para matrizes esparsas: a reflexão pode preencher muitas posições que antes eram zeros.
- **Givens**
  - Adequada para matrizes esparsas ou quando se deseja realizar o método de forma **incremental** (por exemplo, ao inserir linhas uma a uma).
  - Cada rotação zera um único elemento. Pode ser mais lenta que Householder para matrizes densas, pois são necessárias muitas rotações.

Exercícios:

1. Para a matriz abaixo, obtenha a decomposição QR utilizando os seguintes métodos:

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 5 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 7 & 3 \\ 2 & 0 & 3 & 4 \end{bmatrix}.$$

   (a) Gram-Schmidt clássico.
   (b) Gram-Schmidt modificado.
   (c) Householder.
   (d) Givens.

2. Compare o número de operações entre o uso de refletores de Householder e o uso de rotações de Givens da matriz do exercício anterior.

3. Construa a matriz de Hilbert 6×6.
   (a) Aplique a decomposição QR utilizando Gram-Schmidt clássico, Gram-Schmidt modificado, Householder e Givens.
   (b) Compare a precisão da decomposição QR dos quatro métodos.

PERGUNTAS?