MS512 - Análise Numérica 1
Exemplos de Mínimos Quadrados, v1.0

Prof. Maicon Correa

2019-1

Exercícios de Mínimos Quadrados Resolvidos

Exercício 1. Considere os seguintes dados:

t_i	-1.0	0.0	1.0	2.0
y_i	0.0	-1.0	0.0	7.0

a) Plote os pontos da tabela em um gráfico.

b) Monte um sistema sobredeterminado $Ax = b$ para uma reta formada pelos monômios $\varphi_1(t) = 1$ e $\varphi_2(t) = t$, que passe pelos pontos dados. Esse sistema possui solução? Justifique.

c) Encontre a solução de mínimos quadrados a partir da resolução do sistema normal e construa o gráfico desta solução sobre os pontos plotados na letra a).

d) Utilize o processo de Gram-Schmidt (Exercício 17 da lista 4) para construir a fatoração $A = QR$ da matriz A.

e) Utilize a fatoração $A = QR$ para encontrar a solução de mínimos quadrados do sistema $Ax = b$.

Solução a): Os dados da tabela estão plotados na Figura 1.

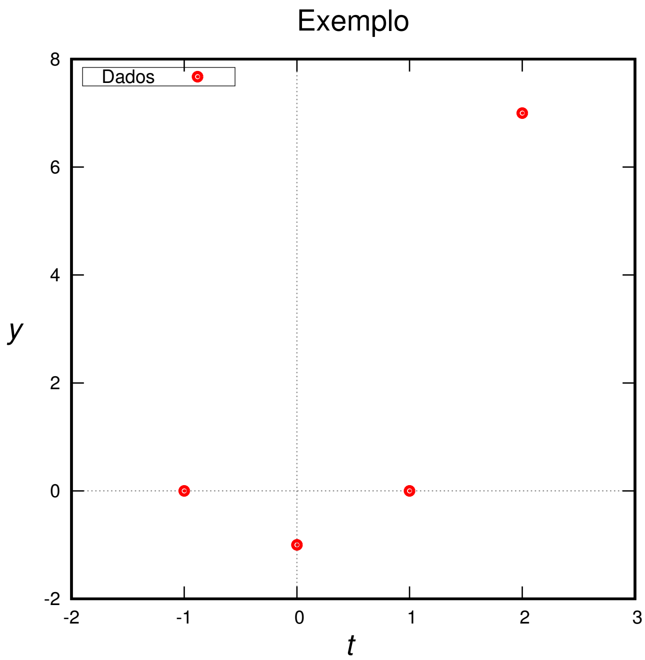

Figure 1: Dados da tabela.

Solução b): Reta:

$$\begin{aligned} p(t) &= a_1\varphi_1(t) + a_2\varphi_2(t) \\ &= a_1 + a_2 t. \end{aligned}$$

Sistema: As equações $p(t_i) = y_i$, $i = 1, 2, 3, 4$ conduzem ao sistema $Ax = b$, com:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}, \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \\ 7 \end{bmatrix}.$$

Sabemos que um sistema linear $Ax = b$ admite solução se e somente se posto$(A, b) =$ posto(A), onde (A, b) denota a matriz aumentada, contendo o vetor b como coluna adicional. Para o caso específico estudado nesta questão, temos posto$(A) = 2$ e posto$(A, b) = 3$, de onde o sistema não possui solução. Em outras palavras, os dados da tabela não podem ser *interpolados* por uma reta. Fato esse já esperado pelo gráfico da letra a).

Solução c): Podemos construir o sistema normal de duas formas, inteiramente equivalentes. A primeira consiste em montar o sistema

$$\begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2 \rangle \\ \langle \boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{\varphi}_1 \rangle & \langle \boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{\varphi}_2 \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\varphi}_1 \rangle \\ \langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\varphi}_2 \rangle \end{bmatrix},$$

onde os vetores $\boldsymbol{\varphi}_1$ e $\boldsymbol{\varphi}_2$ são construídos pela avaliação das respectivas funções $\varphi_1(t)$ e $\varphi_2(t)$ nos pontos t_i, e $\boldsymbol{y}$ possui componentes y_i. É fácil verificar que tais vetores nada mais são do que as colunas da matriz A e o termo independente b, respectivamente

$$\boldsymbol{\varphi}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\varphi}_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \\ 7 \end{bmatrix}.$$

A segunda forma consiste em avaliar o sistema $A^T A x = A^T b$. Ambas estratégias conduzem ao sistema quadrado

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 14 \end{bmatrix},$$

cuja solução é $a_1 = 2/5$ e $a_2 = 11/5$. Com isso, a solução de mínimos quadrados consiste no polinômio

$$p(t) = \frac{2}{5} + \frac{11}{5} t,$$

cujo gráfico é apresentado na Figura 2.

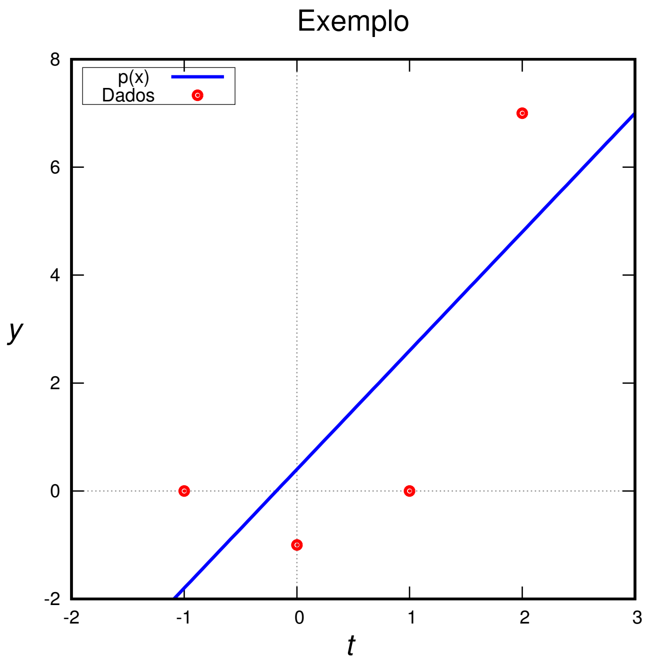

Figure 2: Dados da tabela e reta $p(x)$ obtida pelo ajuste de mínimos quadrados.

Solução d): A matriz A possui duas colunas linearmente independentes, logo possui posto completo e $\dim(\mathcal{C}(A)) = 2$. A partir dessas colunas, utilizamos o processo de Gram-Schmidt para construir uma base ortogonal:

$$\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{\varphi}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

e

$$\boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{\varphi}_2 - \frac{< \boldsymbol{\varphi}_2, \boldsymbol{v}_1 >}{< \boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_1 >} \boldsymbol{v}_1 = \begin{bmatrix} -3/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \\ 3/2 \end{bmatrix}.$$

Normalizando, obtemos os vetores que constituem uma a base ortonormal de $\mathcal{C}(A)$,

$$\boldsymbol{w}_1 = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \boldsymbol{w}_2 = \begin{bmatrix} -3/(2\sqrt{5}) \\ -1/(2\sqrt{5}) \\ 1/(2\sqrt{5}) \\ 3/(2\sqrt{5}) \end{bmatrix}.$$

Por definição, a matriz Q possui esses vetores como coluna:

$$Q = \begin{bmatrix} 1/2 & -3/(2\sqrt{5}) \\ 1/2 & -1/(2\sqrt{5}) \\ 1/2 & 1/(2\sqrt{5}) \\ 1/2 & 3/(2\sqrt{5}) \end{bmatrix}.$$

Já a matriz R possui elementos dados por $r_{ij} =< \boldsymbol{w}_i, \boldsymbol{\varphi}_j >$:

$$r_{11} =< \boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{\varphi}_1 >= 2$$

$$r_{12} =< \boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{\varphi}_2 >= 1$$

$$r_{22} =< \boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{\varphi}_2 >= \frac{5}{\sqrt{5}},$$

resultando em

$$R = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 5/\sqrt{5} \end{bmatrix}.$$

Finalmente podemos verificar que

$$A = \begin{bmatrix} 1/2 & -3/(2\sqrt{5}) \\ 1/2 & -1/(2\sqrt{5}) \\ 1/2 & 1/(2\sqrt{5}) \\ 1/2 & 3/(2\sqrt{5}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 5/\sqrt{5} \end{bmatrix}.$$

Solução e): Partindo de $QRx = b$, pre-multiplicamos por Q^T e obtemos

$$Q^T QRx = Q^T b.$$

Como as colunas de Q são ortonormais, a aplicação $Q^T Q$ fornece a matriz identidade de dimensão 2×2, de onde chegamos ao sistema

$$Rx = Q^T b,$$

ou

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 5/\sqrt{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 11/\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

que novamente fornece a solução $a_1 = 2/5$ e $a_2 = 11/5$.

Exercício 2. Resolva o sistema $Ax = b$ do exercício anterior utilizando fatoração QR com rotações.

Solução: Iniciamos escrevendo a matriz aumentada $\tilde{A} = (A, b)$:

$$\tilde{A} = \left[\begin{array}{rr|r} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 7 \end{array}\right].$$

Sabemos que podemos zerar a j-ésima componente de um vetor x, utilizando a i-ésima componente como referência através de uma rotação plana Q^T onde

$$c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}$$

$$s = \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}$$

1. Para zerar o elemento $\tilde{a}_{21}$ utilizando o elemento $\tilde{a}_{11}$ como referência, temos

   $$c = s = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

   que fornece a matriz de rotação

   $$\hat{Q}_1 = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$$

   e a rotação plana

   $$Q_1^T = \begin{bmatrix} c & s & 0 & 0 \\ -s & c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

   Aplicando Q_1^T à $\tilde{A}$, temos

   $$Q_1^T\tilde{A} = \left[\begin{array}{rr|r} \sqrt{2} & -\sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 7 \end{array}\right].$$

2. Para zerar o elemento da posição $(3, 1)$ utilizando o novo elemento da posição $(1, 1)$ como referência, temos $x_i = \sqrt{2}$, $x_j = 1$ e

   $$c = \frac{\sqrt{6}}{3}, \quad s = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

   e a rotação plana

   $$Q_2^T = \begin{bmatrix} c & 0 & s & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -s & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{6}/3 & 0 & \sqrt{3}/3 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}/3 & 0 & \sqrt{6}/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Aplicando Q_2^T à $Q_1^T\tilde{A}$, temos

$$Q_2^T(Q_1^T\tilde{A}) = \left[\begin{array}{cc|c} \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3}/3 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{6}/2 & \sqrt{6}/6 \\ 1 & 2 & 7 \end{array}\right].$$

3. Para zerar o elemento da posição $(4,1)$ utilizando o novo elemento da posição $(1,1)$ como referência, temos $x_i = \sqrt{3}$, $x_j = 1$ e

$$c = \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad s = \frac{1}{2}$$

e a rotação plana

$$Q_3^T = \begin{bmatrix} c & 0 & 0 & s \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -s & 0 & 0 & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}$$

Aplicando Q_3^T à $Q_2^TQ_1^T\tilde{A}$, temos

$$Q_3^T(Q_2^TQ_1^T\tilde{A}) = \left[\begin{array}{cc|c} 2 & 1 & 3 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ 0 & \sqrt{6}/2 & \sqrt{6}/6 \\ 0 & \sqrt{3} & 11\sqrt{3}/3 \end{array}\right].$$

4. Para zerar o elemento da posição $(3,2)$ utilizando o novo elemento da posição $(2,2)$ como referência, temos $x_i = \sqrt{2}/2$, $x_j = \sqrt{6}/2$ e

$$c = \frac{1}{2}, \quad s = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

e a rotação plana

$$Q_4^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & s & 0 \\ 0 & -s & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Aplicando Q_4^T à $Q_3^TQ_2^TQ_1^T\tilde{A}$, temos

$$Q_4^T(Q_3^TQ_2^TQ_1^T\tilde{A}) = \left[\begin{array}{cc|c} 2 & 1 & 3 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6}/3 \\ 0 & \sqrt{3} & 11\sqrt{3}/3 \end{array}\right].$$

5. Para zerar o elemento da posição $(4,2)$ utilizando o novo elemento da posição $(2,2)$ como referência, temos $x_i = \sqrt{2}$, $x_j = \sqrt{3}$ e

$$c = \frac{\sqrt{10}}{5}, \quad s = \frac{\sqrt{15}}{5}$$

e a rotação plana

$$Q_5^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & s \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -s & 0 & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{10}/5 & 0 & \sqrt{15}/5 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\sqrt{15}/5 & 0 & \sqrt{10}/5 \end{bmatrix}.$$

Aplicando Q_5^T à $Q_4^T Q_3^T Q_2^T Q_1^T \tilde{A}$, temos

$$Q_5^T(Q_4^T Q_3^T Q_2^T Q_1^T \tilde{A}) = \left[\begin{array}{cc|c} 2 & 1 & 3 \\ 0 & \sqrt{5} & 11\sqrt{5}/5 \\ 0 & 0 & \sqrt{6}/3 \\ 0 & 0 & 11\sqrt{30}/15 \end{array}\right],$$

ou seja

$$Q^T \tilde{A} = \left[\begin{array}{c|c} \hat{R} & \hat{b} \\ 0 & \bar{b} \end{array}\right],$$

onde $Q^T = Q_5^T Q_4^T Q_3^T Q_2^T Q_1^T$. A solução do problema é então dada por

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

ou seja,

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & \sqrt{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 11\sqrt{5}/5 \end{bmatrix},$$

que fornece $a_1 = 2/5$ e $a_2 = 11/5$.

Exercício 3. Resolva o sistema $Ax = b$ do exercício anterior utilizando fatoração QR com refletores (Transformações de Householder).

Solução: Novamente, iniciamos com a matriz aumentada $\tilde{A} = (A, b)$:

$$\tilde{A} = \left[\begin{array}{rr|r} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 7 \end{array}\right].$$

1. Para produzir zeros abaixo do elemento $(1,1)$, tomamos o refletor $Q_1 = I - \gamma u u^T$, tal que

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\tau \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

onde

$$\tau = +\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2} = 2.$$

Note que o sinal foi escolhido como sendo o mesmo do elemento da posição $(1,1)$. O vetor u é definido como

$$u = \begin{bmatrix} 1 \\ x_2/(\tau + x_1) \\ x_3/(\tau + x_1) \\ x_4/(\tau + x_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/3 \\ 1/3 \\ 1/3 \end{bmatrix}$$

e

$$\gamma = \frac{(\tau + x_1)}{\tau} = \frac{3}{2}.$$

Para avaliar a ação de Q_1 sobre $\tilde{A}$, não é necessário calcular Q_1 explicitamente. Ao invés, utilizamos a seguinte sequencia:

$$\begin{aligned} Q_1 \tilde{A} &= (I - \gamma u u^T)\tilde{A} \\ &= \tilde{A} - \gamma u u^T \tilde{A} \\ &= \tilde{A} - (\gamma u)(u^T \tilde{A}) \\ &= \tilde{A} - v w^T, \end{aligned}$$

onde $v = \gamma u$ e $w^T = u^T \tilde{A}$. Primeiramente, calculamos

$$v = \gamma u = \begin{bmatrix} 3/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}.$$

Depois, calculamos

$$\begin{aligned} w^T &= u^T \tilde{A} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{bmatrix} \left[\begin{array}{rr|r} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 7 \end{array}\right] \\ &= \left[\begin{array}{rr|r} 2 & 0 & 2 \end{array}\right] \end{aligned}$$

e o produto

$$vw^T = \begin{bmatrix} 3/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} \left[\begin{array}{cc|c} 2 & 0 & 2 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{cc|c} 3 & 0 & 3 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{array}\right].$$

Finalmente, calculamos $Q_1\tilde{A}$

$$Q_1\tilde{A} = \tilde{A} - vw^T = \left[\begin{array}{rr|r} -2 & -1 & -3 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 6 \end{array}\right].$$

2. Agora, para produzir zeros abaixo do elemento $(2,2)$, analisamos a submatriz

$$\tilde{B} = \left[\begin{array}{r|r} 0 & -2 \\ 1 & -1 \\ 2 & 6 \end{array}\right],$$

e tomamos o refletor $Q_2^\star = I - \gamma uu^T$, tal que

$$Q_2^\star = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\tau \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

onde

$$\tau = +\sqrt{0^2 + 1^2 + 2^2} = \sqrt{5}.$$

O vetor u é definido como

$$u = \begin{bmatrix} 1 \\ x_2/(\tau + x_1) \\ x_3/(\tau + x_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{5}/5 \\ 2\sqrt{5}/5 \end{bmatrix}$$

e

$$\gamma = \frac{(\tau + x_1)}{\tau} = 1.$$

O refletor $Q_2^\star$ atuará sobre a submatriz $\tilde{B}$, na forma

$$\begin{aligned} Q_2^\star\tilde{B} &= (I - \gamma uu^T)\tilde{B} \\ &= \tilde{B} - vw^T, \end{aligned}$$

onde $v = \gamma u$ e $w^T = u^T\tilde{B}$. O cálculo de v é trivial uma vez que $\gamma = 1$ e

$$v = \gamma u = u.$$

O vetor w^T é calculado como

$$\begin{aligned} w^T &= u^T\tilde{B} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{5}/5 & 2\sqrt{5}/5 \end{bmatrix} \left[\begin{array}{r|r} 0 & -2 \\ 1 & -1 \\ 2 & 6 \end{array}\right] \\ &= \left[\begin{array}{c|c} \sqrt{5} & -2 + 11\sqrt{5}/5 \end{array}\right] \end{aligned}$$

e o produto

$$vw^T \;=\; \left[\begin{array}{c} 1 \\ \sqrt{5}/5 \\ 2\sqrt{5}/5 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c|c} \sqrt{5} & -2+11\sqrt{5}/5 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{r|r} \sqrt{5} & -2+11\sqrt{5}/5 \\ 1 & -2\sqrt{5}/5+11/5 \\ 2 & -4\sqrt{5}/5+22/5 \end{array}\right].$$

Finalmente, calculamos $Q_2^\star \tilde{B}$

$$Q_2^\star \tilde{B} \;=\; \tilde{B} - vw^T = \left[\begin{array}{r|r} -\sqrt{5} & -11\sqrt{5}/5 \\ 0 & -16/5+2\sqrt{5}/5 \\ 0 & 8/5+4\sqrt{5}/5 \end{array}\right].$$

Definindo a matriz

$$Q_2 = \left[\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & Q_2^\star \end{array}\right],$$

temos que

$$Q_2 Q_1 \tilde{A} = \left[\begin{array}{rr|r} -2 & -1 & -3 \\ 0 & {\color{blue}-\sqrt{5}} & {\color{blue}-11\sqrt{5}/5} \\ 0 & {\color{blue}0} & {\color{blue}-16/5+2\sqrt{5}/5} \\ 0 & {\color{blue}0} & {\color{blue}8/5+4\sqrt{5}/5} \end{array}\right].$$

Assim como no exercício anterior, temos

$$Q^T \tilde{A} = \left[\begin{array}{c|c} \hat{R} & \hat{b} \\ 0 & \bar{b} \end{array}\right],$$

e a solução do problema é então dada por

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

ou seja,

$$\left[\begin{array}{rr} -2 & -1 \\ 0 & -\sqrt{5} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} a_1 \\ a_2 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{r} -3 \\ -11\sqrt{5}/5 \end{array}\right],$$

que fornece $a_1 = 2/5$ e $a_2 = 11/5$.