

Decomposições ortogonais



Ricardo Biloti

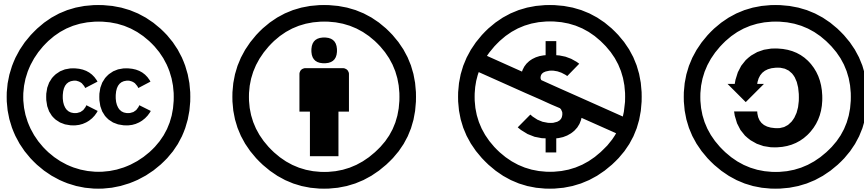
biloti@unicamp.br

Álgebra Linear Computacional

2S/2021

www.ime.unicamp.br/~biloti

Lined area for notes or calculations, featuring a vertical red margin line on the left and horizontal gray lines.

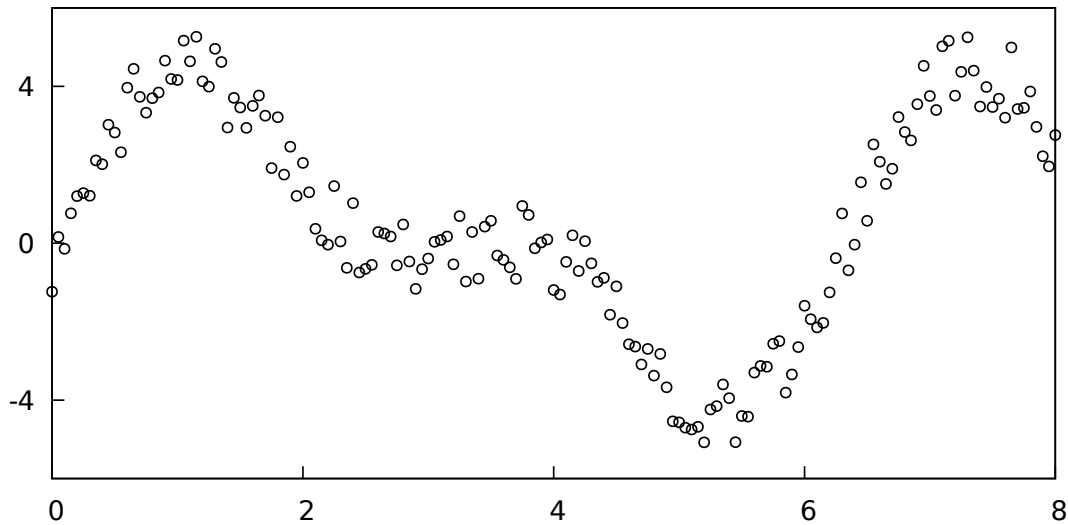


Este trabalho é licenciado sob os termos da Licença Internacional Creative Commons Atribuição-NãoComercial-Compartilhalgal 4.0.

Para ver uma cópia desta licença, visite <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>.

Seus direitos e deveres são:

- Você é livre para copiar e redistribuir este material, em qualquer meio ou formato, para adaptá-lo, transformá-lo ou utilizá-lo para construir seu próprio material.
- Você deve dar os créditos apropriados, fornecendo link para a licença e indicando se alterações foram feitas. Você pode fazer isto de qualquer forma razoável, porém sem tentar passar a ideia ou sugerir que o autor endosse suas alterações ou seu uso do material.
- Você não pode utilizar este material para fins comerciais.
- Se você alterar, transformar ou construir seu próprio material com base neste trabalho, você deverá distribuí-lo sob a mesma licença usada no original.



O gráfico exibe 160 pontos amostrados de uma função. Imagine que esses pontos foram obtidos experimentalmente, e, por isso, as medidas estão contaminadas com erro experimental. Nosso objetivo é obter uma aproximação para a função que deu origem aos dados.

Mesmo não podendo confiar individualmente em nenhum dos valores amostrados, ainda é possível inferir a partir dessa nuvem de pontos o comportamento esperado da função.

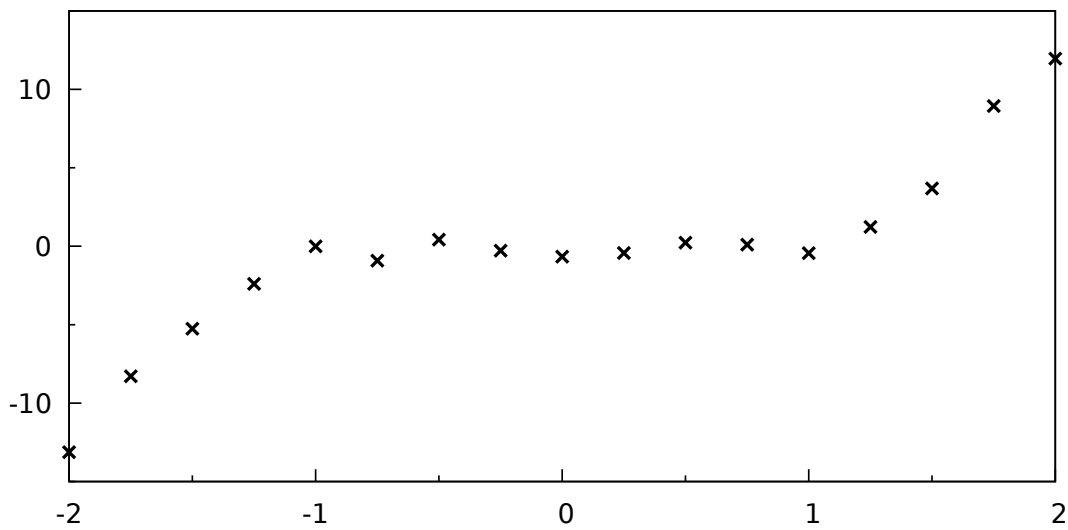
Como as medidas estão contaminadas com erro, não faz sentido, exigir que a função aproximada reproduza exatamente os valores amostrados.

Dado um conjunto de pontos,
encontrar uma função que melhor os ajuste

O ajuste de curva pode ser formulado, genericamente, com o problema de encontrar a função que melhor ajusta os pontos (do plano) amostrados.

Para poder de fato trabalhar esse problema precisaremos ainda descrevê-lo de forma bem mais precisa. Por conta disso, pergunte-se:

O que deve ser mais bem especificado na descrição desse problema?



Vamos desenvolver as ideias por trás do ajuste de curva através de um exemplo. Ao final, formalizaremos o procedimento.

Considere os 17 pontos exibidos no gráfico, como amostras de uma função real. Se queremos encontrar uma função que represente esses pontos, a primeira pergunta é:

Que tipo de função poderia ter gerado pontos como esses?

Dentre diversas possibilidades, parece razoável pelo aspecto do gráfico, a escolha de um polinômio de grau 3.

$$\phi(x) = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + c_3\phi_3(x) + c_4\phi_4(x)$$

$$\phi_1(x) = 1$$

$$\phi_2(x) = x$$

$$\phi_3(x) = x^2$$

$$\phi_4(x) = x^3$$

Nossa proposta de função para o ajuste será um polinômio de grau 3 que, de forma geral, pode ser representado como combinação linear das funções 1, x , x^2 e x^3 .

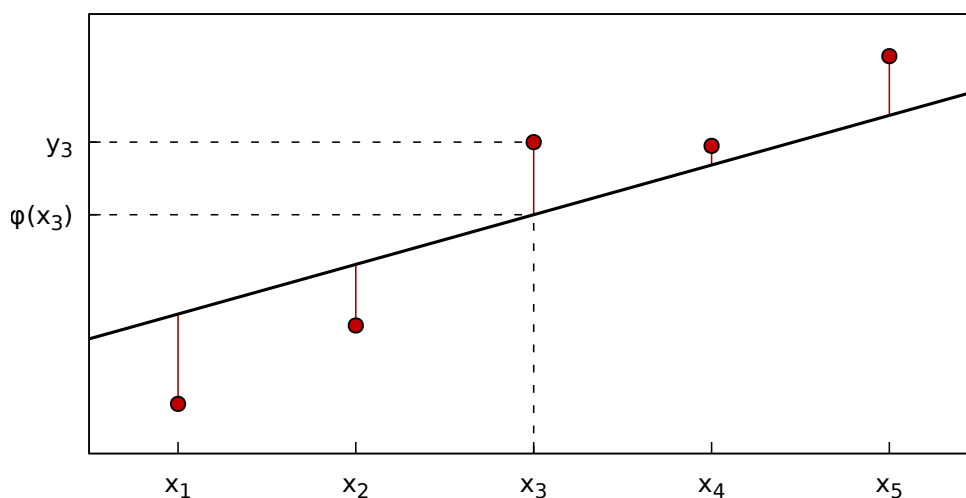
Desta forma, o problema de encontrar a função ϕ que melhor se ajuste aos dados, pela forma como estamos representando a função ϕ , passa a ser o problema de determinar os coeficientes c_1 , c_2 , c_3 e c_4 .

Esse era o primeiro ponto que carecia de melhor especificação na descrição do problema.

Qualidade do ajuste



Como saber se ϕ ajusta bem os dados?



Vamos tratar agora do segundo aspecto na definição do problema que precisa ser especificado. É necessário tornar explícito o conceito de **melhor ajuste**.

Vários critérios podem ser propostos para definir a qualidade do ajuste dos dados por uma função.

Vamos supor que as medidas foram tomadas exatamente em x_1, \dots, x_m , ou seja, no conjunto de pontos amostrados não há erro amostral na ordenadas do pontos, mas apenas nas abscissas. Um possível critério para quantificar a qualidade do ajuste seria somar os desvios entre o valor amostrado (pontos destacados no gráfico) e o valor predito pelo função ϕ (a reta preta, neste exemplo). Nesse sentido a função que melhor ajusta os dados seria aquela cuja soma de desvios verticais fosse a menor possível. A medida a ser minimizada seria então uma **soma de módulos** (ou valores absolutos). Apesar de ser um critério válido, como a função módulo não é diferenciável, não poderemos utilizar as ferramentas de Cálculo Diferencial para resolver esse problema de minimização. Por isto, é comum adotar como medida de qualidade do ajuste, não a soma dos desvios em módulo, mas sim a soma dos quadrados do desvios, ficando assim com uma função diferenciável para ser minimizada.

Dado $\{(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)\} \subset \mathbb{R}^2$, queremos encontrar

$$\phi(x) = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + c_3\phi_3(x) + c_4\phi_4(x)$$

que minimize

$$\|r\|^2 \equiv \|\phi - y\|^2 = \sum_{i=1}^m (\phi(x_i) - y_i)^2$$

Notação: $\phi = (\phi(x_1), \phi(x_2), \dots, \phi(x_m))^T$ e $y = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T$

O problema de ajuste, agora colocado de forma precisa, é encontrar a função ϕ , **combinação linear** de funções prescritas, que minimiza a soma dos quadrados dos desvios entre os valores amostrados e os valores preditos pela função ϕ .

Utilizando a definição de **norma** de vetor, e denotando o vetor das abscissas por y e o vetor da função ϕ avaliada sobre as ordenadas tabeladas também por ϕ , o critério de quadrados mínimos pode ser representado por

$$\|\phi - y\|^2.$$

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi(x_1) \\ \phi(x_2) \\ \vdots \\ \phi(x_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1\phi_1(x_1) + c_2\phi_2(x_1) + c_3\phi_3(x_1) + c_4\phi_4(x_1) \\ c_1\phi_1(x_2) + c_2\phi_2(x_2) + c_3\phi_3(x_2) + c_4\phi_4(x_2) \\ \vdots \\ c_1\phi_1(x_m) + c_2\phi_2(x_m) + c_3\phi_3(x_m) + c_4\phi_4(x_m) \end{pmatrix}$$

Usando a definição da função ϕ , podemos reescrever de forma explícita o vetor ϕ em função dos coeficientes c_1, \dots, c_4 .

$$\phi = Ac$$

$$A = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \phi_3(x_1) & \phi_4(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \phi_3(x_2) & \phi_4(x_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_1(x_m) & \phi_2(x_m) & \phi_3(x_m) & \phi_4(x_m) \end{pmatrix}$$

O vetor ϕ pode ser representado por um produto matricial, Ac , onde cada elemento da matriz A é a avaliação de uma das funções ϕ_j prescritas em um dos pontos x_i amostrados, e o vetor c é o vetor dos coeficientes a serem determinados.

O que o Octave faria?



$$Ax = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ -1 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & 0 \\ -3 & 6 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ -8 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = b$$

```
>> A = [ 3 1 0; 2 1 1; -1 3 4; 0 1 0; -3 6 -1];
```

```
>> b = [ 3; 1; -8; 0; 1];
```

```
>> x = A\b
```

```
x =
```

```
 1.01190
```

```
 0.33191
```

```
-1.96307
```

```
>> norm(A*x-b)
```

```
ans = 0.79880
```


Teorema

Toda matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ pode ser decomposta no produto de uma matriz ortogonal $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ por uma matriz triangular superior $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

$$A = QR$$

Se $A = QR$, então

$$\begin{aligned}\|Ax - b\|_2^2 &= \|QRx - b\|_2^2 \\ &= \|Q(Rx - Q^T b)\|_2^2 \\ &= \|Rx - Q^T b\|_2^2\end{aligned}$$

Minimizar $\|Ax - b\|_2$ é o mesmo que minimizar $\|Rx - Q^T b\|_2$

Sistema triangular



Seja $z = Q^T b$. Como R é $m \times n$ ($m > n$) e triangular superior,

$$R = \begin{bmatrix} \hat{R} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad z = \begin{bmatrix} \hat{z} \\ \tilde{z} \end{bmatrix}$$

onde \hat{R} é $n \times n$ e triangular superior. Com isso

$$\begin{aligned} \|Rx - z\|_2^2 &= \left\| \begin{bmatrix} \hat{R}x - \hat{z} \\ -\tilde{z} \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\ &= \|\hat{R}x - \hat{z}\|^2 + \|\tilde{z}\|^2 \end{aligned}$$

1. Cálculo da decomposição QR



No Octave:

```
>> [Q,R] = qr (A)
```

$$Q = \begin{bmatrix} -0.80064 & 0.11894 & -0.34555 & 0.47466 & 0.01070 \\ -0.48038 & -0.04460 & -0.06820 & -0.84369 & -0.22535 \\ -0.00000 & -0.57983 & -0.35919 & -0.13241 & 0.71919 \\ -0.16013 & -0.78798 & 0.37738 & 0.21128 & -0.40791 \\ -0.32026 & 0.16354 & 0.77750 & -0.02677 & 0.51524 \end{bmatrix}$$

$$R = \begin{bmatrix} -6.24500 & 2.24179 & 0.00000 \\ 0.00000 & -1.72463 & 2.89917 \\ 0.00000 & 0.00000 & -1.89600 \\ \hline 0.00000 & 0.00000 & 0.00000 \\ 0.00000 & 0.00000 & 0.00000 \end{bmatrix}$$

Lined area for notes or calculations.

2. Cálculo de z



$$z = Q^T b = \begin{bmatrix} -1.681346 \\ -0.330059 \\ -2.139710 \\ -0.092113 \\ -0.239363 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.681346 \\ -0.330059 \\ -2.139710 \\ -0.092113 \\ -0.239363 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{z} \\ \tilde{z} \end{bmatrix}$$

3. Resolução de $\hat{R}x = \hat{z}$



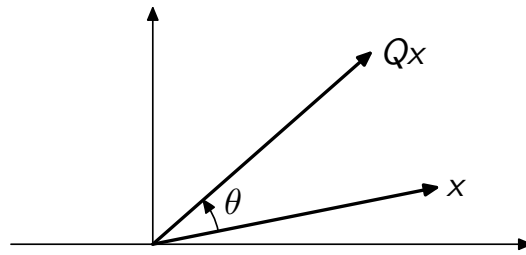
$$\begin{bmatrix} -6.24500 & 2.24179 & 0.00000 \\ 0.00000 & -1.72463 & 2.89917 \\ 0.00000 & 0.00000 & -1.89600 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} -1.681346 \\ -0.330059 \\ -2.139710 \end{bmatrix}$$

$$x^* = (1.0189, 2.0885, 1.1285)^T$$

A large area of the page is filled with horizontal grey lines, resembling a notebook page. A vertical red line is positioned on the left side, approximately one-tenth of the way across the page, serving as a margin.

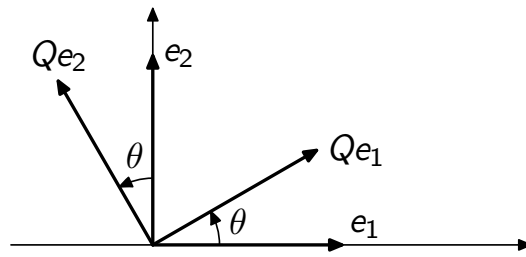
$$Ax^* = \begin{bmatrix} 2.04628 \\ 0.96835 \\ 0.95995 \\ -0.27818 \\ -1.17914 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 2.0 \\ 1.1 \\ 0.8 \\ -0.2 \\ -1.3 \end{bmatrix} = b$$

$$\|Ax^* - b\|_2 = 0.25647 = \|\tilde{z}\|_2$$



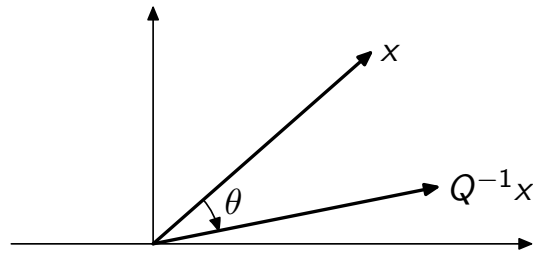
$$Qx = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = ?$$

Lined area for notes or calculations, featuring a vertical red margin line on the left and horizontal grey lines.



$$Qe_1 = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{bmatrix} \quad Qe_2 = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{bmatrix}$$

$$Q = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$



$$Q = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

$$Q^{-1} = \begin{bmatrix} \cos(-\theta) & -\sin(-\theta) \\ \sin(-\theta) & \cos(-\theta) \end{bmatrix} \quad Q^{-1} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} = Q^T$$

Se $x = (x_1, x_2)^T$, com $x_2 \neq 0$, então existe uma rotação tal que

$$Q^T x = \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$Q^T x = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta \\ -x_1 \sin \theta + x_2 \cos \theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix}$$

ou seja

$$x_1 \cos \theta + x_2 \sin \theta = \alpha, \quad x_1 \sin \theta = x_2 \cos \theta, \quad \alpha = \|x\|_2$$

Logo

$$\cos \theta = \frac{x_1}{\|x\|_2} \quad \text{e} \quad \sin \theta = \frac{x_2}{\|x\|_2}$$

Triangularizando A



Seja $A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$ e Q tal que

$$Q^T \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} \\ 0 \end{bmatrix}$$

Então

$$Q^T A = Q^T \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} \\ 0 & r_{22} \end{bmatrix} = R$$

ou seja

$$A = QR$$

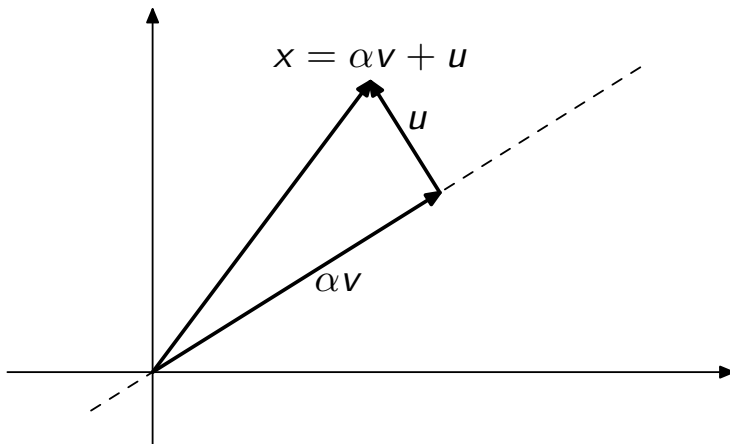
A large area of the page is filled with horizontal lines, resembling a notebook page. A vertical red line is positioned on the left side, approximately one-tenth of the way across the page, serving as a margin.

$$Q_{(i,j)}^T x = Q_{(i,j)}^T \begin{pmatrix} \vdots \\ x_{i-1} \\ x_j \\ x_{i+1} \\ \vdots \\ x_{j-1} \\ x_j \\ x_{j+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots \\ x_{i-1} \\ \alpha \\ x_{i+1} \\ \vdots \\ x_{j-1} \\ 0 \\ x_{j+1} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

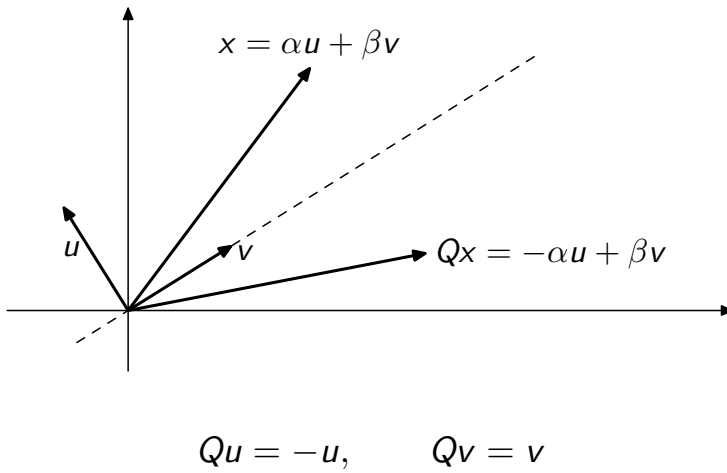
Lined area for notes or calculations, featuring a vertical red margin line on the left and horizontal grey lines.

- ▶ $R \leftarrow A, Q \leftarrow I$
- ▶ Para $j = 1, \dots, (n - 1)$
 - ▶ Para $i = (j + 1), \dots, n$
 - ▶ Usando $(r_{j,j}, r_{i,j})$ defina $Q_{(i,j)}$
 - ▶ $R \leftarrow Q_{(i,j)}^T R$ (só altera as linhas j e i)
 - ▶ $Q \leftarrow Q Q_{(i,j)}$ (só altera as colunas j e i)





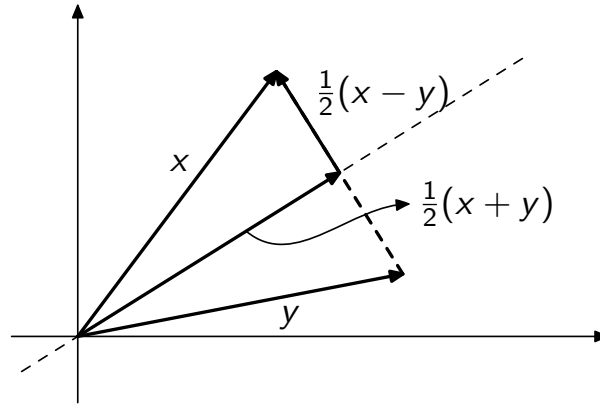
- ▶ u e v são ortonormais
- ▶ $v^T x = v^T(\alpha v + u) = \alpha$
- ▶ $\text{proj}_v x = (v^T x)v = v(v^T x)$
- ▶ $P = vv^T$ (matriz de projeção)



- ▶ $Qx = x - 2\alpha u$
- ▶ $\alpha u = \text{proj}_u x = uu^T x$
- ▶ $Qx = x - 2uu^T x = (I - 2uu^T)x$
- ▶ $Qu = u - 2uu^T u = -u$
- ▶ $Qv = v - 2uu^T v = v$
- ▶ $Q^T Q = I$
- ▶ $Q^T = Q$

Teorema

Sejam $x, y \in \mathbb{R}^n$, tais que $x \neq y$, mas $\|x\|_2 = \|y\|_2$. Então, existe um único refletor Q tal que $Qx = y$.



- ▶ $x \neq 0$
- ▶ $y \leftarrow -\sigma e_1$, onde $\sigma = \pm \|x\|_2$
- ▶ $u \leftarrow (x - y) = (x_1 + \sigma, x_2, \dots, x_n)^T$
- ▶ $Q \leftarrow I - \gamma uu^T$, $\gamma = 2/\|u\|_2^2 = 1/(\sigma u_1)$,

$$\begin{aligned}\|u\|_2^2 &= (x_1 + \sigma)^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 = \|x\|_2^2 + 2\sigma x_1 + \sigma^2 \\ &= 2(\|x\|_2^2 + \sigma x_1) = 2\sigma(\sigma + x_1) = 2\sigma u_1\end{aligned}$$

- ▶ $Qx = -\sigma e_1$



- ▶ Seja $\hat{A}_{22} = [\hat{a}_2 \hat{a}_3 \cdots \hat{a}_n] \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$
- ▶ Seja \hat{Q}_2 o refletor tal que $\hat{Q}_2^T \hat{a}_2 = -\sigma_2 e_1$.

$$Q_2^T Q_1^T A = \left[\begin{array}{c|ccc} 1 & & & \\ \hline & & & \\ & \hat{Q}_2^T & & \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|ccc} -\sigma_1 & \hat{a}_{12} & \cdots & \hat{a}_{1n} \\ \hline & & \hat{A}_{22} & \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|ccc} -\sigma_1 & \hat{a}_{12} & \cdots & \hat{a}_{1n} \\ \hline & -\sigma_2 & & \\ & & \hat{A}_{33} & \end{array} \right]$$

O que vimos até aqui?



Seja A é $m \times n$, com $m > n$, e $b \in \mathbb{R}^m$. Considere o sistema $Ax = b$.

- ▶ O sistema pode não ter solução
- ▶ x^* é solução de quadrados mínimos se $\|Ax^* - b\|_2 = \min_x \|Ax - b\|_2$
- ▶ $A \setminus b$, no Octave ou Matlab, retorna x^*
- ▶ Toda matriz A tem decomposição QR
- ▶ QR pode ser computada por rotações ou reflexões
- ▶ x^* é solução de $\hat{R}x = \hat{z}$, onde $z = Q^T b$, $\hat{R} = R(1:n, 1:n)$ e $\hat{z} = z(1:n)$

A large area of the slide is filled with horizontal grey lines, resembling a notebook page. A vertical red line is positioned on the left side, approximately one-tenth of the way across the page, serving as a margin.

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \dots \quad e_n = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$$

ou

$$q_1 = \begin{bmatrix} 3/5 \\ 4/5 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad q_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

As colunas de uma matriz Q $n \times n$ formam um conjunto ortonormal de vetores.

Se $Q = [q_1 \ q_2 \ \dots \ q_n]$, como $Q^T Q = I$, temos que

$$Q^T Q = \begin{bmatrix} q_1^T \\ q_2^T \\ \vdots \\ q_n^T \end{bmatrix} [q_1 \ q_2 \ \dots \ q_n] = \begin{bmatrix} q_1^T q_1 & q_1^T q_2 & \cdots & q_1^T q_n \\ q_2^T q_1 & q_2^T q_2 & \cdots & q_2^T q_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_n^T q_1 & q_n^T q_2 & \cdots & q_n^T q_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

Uma matriz Q $m \times n$, com $m \geq n$, com colunas ortonormais é dita uma **isometria**.

Se Q é uma isometria, então $Q^T Q = I \in \mathbb{R}^{n \times n}$, mas não necessariamente $Q Q^T = I \in \mathbb{R}^{m \times m}$.

Por exemplo,

$$Q = \begin{bmatrix} 3/5 & 0 \\ 4/5 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad Q^T Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad Q Q^T = \begin{bmatrix} 0.36 & 0.48 & 0 \\ 0.48 & 0.64 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \neq I$$

Teorema

Toda matriz $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, pode ser decomposta no produto de uma isometria $\hat{Q} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ por uma matriz triangular superior $\hat{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ com diagonal positiva, como

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

Com efeito, sabemos que $A = QR$, com $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$, ortogonal e $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Basta considerar a partição

$$A = QR = [\hat{Q} \tilde{Q}] \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix} = \hat{Q}\hat{R} + \tilde{Q}0.$$

Além disso, se A tiver posto completo, a decomposição é única.

- ▶ $q_1 \leftarrow v_1 / \|v_1\|_2$
- ▶ $q_2 \in \text{span}\{q_1, v_2\}$:
 - ▶ $\tilde{q}_2 \leftarrow v_2 - r_{12}q_1$
 - ▶ $0 = \langle \tilde{q}_2, q_1 \rangle = \langle v_2, q_1 \rangle - r_{12}\langle q_1, q_1 \rangle \Rightarrow r_{12} \leftarrow \langle v_2, q_1 \rangle$
 - ▶ $r_{22} \leftarrow \|\tilde{q}_2\|_2$
 - ▶ $q_2 \leftarrow \tilde{q}_2 / r_{22}$

Exercício: mostre que $\text{span}\{v_1, v_2\} = \text{span}\{q_1, q_2\}$.

$$\text{span}\{v_1, v_2, \dots, v_{k-1}\} = \text{span}\{q_1, q_2, \dots, q_{k-1}\}$$

▶ $q_k \in \text{span}\{q_1, q_2, \dots, q_{k-1}, v_k\}$:

$$\text{▶ } \tilde{q}_k \leftarrow v_k - \sum_{j=1}^{k-1} r_{jk} q_j$$

$$\text{▶ } 0 = \langle \tilde{q}_k, q_i \rangle = \langle v_k, q_i \rangle - \sum_{j=1}^{k-1} r_{jk} \langle q_j, q_i \rangle \Rightarrow r_{ik} \leftarrow \langle v_k, q_i \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, k-1$$

$$\text{▶ } r_{kk} \leftarrow \|\tilde{q}_k\|_2$$

$$\text{▶ } q_k \leftarrow \tilde{q}_k / r_{kk}$$

$$v_k = \sum_{j=1}^{k-1} r_{jk} q_j + r_{kk} q_k$$

Algoritmo de Gram-Schmidt



Dados $v_1, v_2, \dots, v_n \in \mathbb{R}^m$ vetores LI:

- ▶ Para $k = 1, \dots, n$:
 - ▶ Para $i = 1, \dots, k - 1$:
 - ▶ $r_{ik} \leftarrow \langle v_k, v_i \rangle$
 - ▶ Para $i = 1, \dots, k - 1$:
 - ▶ $v_k \leftarrow v_k - r_{ik}v_i$
 - ▶ $r_{kk} \leftarrow \|v_k\|_2$
 - ▶ Se $r_{kk} = 0$, então v_1, v_2, \dots, v_k são LD. FIM.
 - ▶ $v_k \leftarrow v_k / r_{kk}$

A large area of the page is reserved for notes, featuring a vertical red margin line on the left and horizontal grey lines for writing.

$$v_k = r_{1k}q_1 + r_{2k}q_2 + \cdots + r_{kk}q_k$$

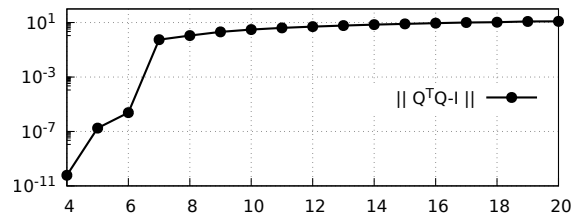
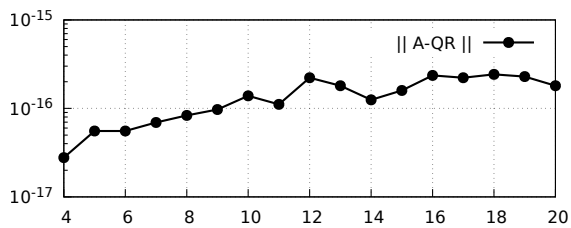
$$[v_1 \ v_2 \ v_3 \ \cdots \ v_n] = [q_1 \ q_2 \ q_3 \ \cdots \ q_n] \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & r_{23} & \cdots & r_{2n} \\ & & r_{33} & \cdots & r_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & r_{nn} \end{bmatrix}$$

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

Experimento



```
n = 4:20;
for k = 1:length(n)
    A = hilb(n(k));
    [Q,R] = gs(A);      # Gram-Schmidt
    E(k,1) = norm(A-Q*R, inf);
    E(k,2) = norm(Q'*Q - eye(n(k)), inf);
endfor
semilogy(n, E(:,1))
semilogy(n, E(:,2))
```



Algoritmo de Gram-Schmidt modificado



Dados $v_1, v_2, \dots, v_n \in \mathbb{R}^m$ vetores LI:

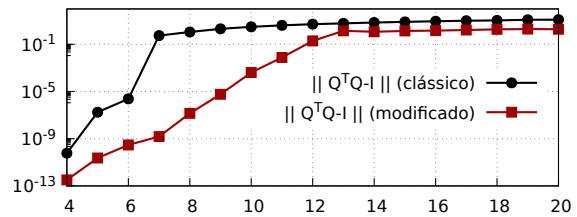
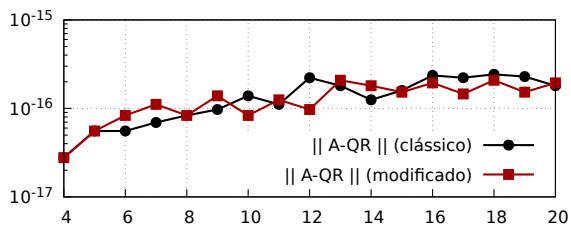
- ▶ Para $k = 1, \dots, n$:
 - ▶ $r_{kk} \leftarrow \|v_k\|_2$
 - ▶ Se $r_{kk} = 0$, então o v_1, v_2, \dots, v_k são LD. FIM.
 - ▶ $v_k \leftarrow v_k / r_{kk}$
 - ▶ Para $j = k + 1, \dots, n$:
 - ▶ $r_{kj} \leftarrow \langle v_j, v_k \rangle$
 - ▶ $v_j \leftarrow v_j - r_{kj} v_k$

A large area of the page is filled with horizontal lines for writing, resembling a notebook page. A vertical red line is positioned on the left side, approximately one-tenth of the way across the page, serving as a margin.

Experimento



```
n = 4:20;
for k = 1:length(n)
    A = hilb(n(k));
    [Q,R] = gsm(A);      # Gram-Schmidt modificado
    E(k,3) = norm(A-Q*R, inf);
    E(k,4) = norm(Q'*Q - eye(n(k)), inf);
endfor
semilogy(n, E(:,1), n, E(:,3))
semilogy(n, E(:,2), n, E(:,4))
```



- ▶ Para resolver o problema de quadrados mínimos, GS modificado e a decomposição QR computada por refletores são igualmente acurados.
- ▶ Para ortogonalizar vetores, QR por refletores é bem melhor que GS modificado, que tem seu desempenho degradado a medida que os vetores ficam próximos de serem LD.
- ▶ Porém, para obter os vetores ortogonais, QR por refletores custa aproximadamente o dobro de operações de ponto flutuante em comparação com GS modificado.

- ▶ $S = \{(1, 0, 0)\}$, $S^\perp = \{(0, x_2, x_3) \mid x_2, x_3 \in \mathbb{R}\}$
- ▶ $S = \text{span}\{v_1, v_2\} \subset \mathbb{R}^3$, $S^\perp = \text{span}\{u\}$, onde $u = v_1 \times v_2$.
- ▶ $S = \{\mathbf{0}\}$, $S^\perp = \mathbb{R}^n$
- ▶ Seja $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ uma base ortogonal para \mathbb{R}^n e $S = \text{span}\{v_1, \dots, v_k\}$,
 $S^\perp = \text{span}\{v_{k+1}, \dots, v_n\}$ (exercício)

S^\perp é subespaço vetorial

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gera uma transformação linear de \mathbb{R}^n em \mathbb{R}^m

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad x \mapsto Ax \in \mathbb{R}^m$$

Quatro espaços fundamentais:

- ▶ Imagem de A : $\mathcal{R}(A) \equiv \{y = Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\} \subset \mathbb{R}^m$
- ▶ Núcleo de A : $\mathcal{N}(A) \equiv \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\}$
- ▶ Imagem de A^T : $\mathcal{R}(A^T) \equiv \{x = A^T y \mid y \in \mathbb{R}^m\} \subset \mathbb{R}^n$
- ▶ Núcleo de A^T : $\mathcal{N}(A^T) \equiv \{y \in \mathbb{R}^m \mid A^T y = 0\}$

O espaço imagem de A também é denominado espaço coluna de A , assim como o espaço imagem de A^T é também denominado espaço linha de A .

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 6 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

► $y = Ax = x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ 0 \end{bmatrix} = (x_1 + 3x_2) \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}$. Portanto, $\mathcal{R}(A) = \text{span}\{(1, 2, 0)^T\}$.

► $0 = Ax = (x_1 + 3x_2) \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow x_1 = -3x_2$. Logo, $\mathcal{N}(A) = \text{span}\{(-3, 1)^T\}$.

Teorema

$$\mathcal{R}(A)^\perp = \mathcal{N}(A^T) \quad \text{e} \quad \mathcal{N}(A)^\perp = \mathcal{R}(A^T)$$

Seja $y \in \mathcal{R}(A)^\perp$, então para todo $x \in \mathbb{R}^n$, $\langle Ax, y \rangle = 0$. Em particular para $x = A^T y$, temos que

$$0 = \langle Ax, y \rangle = \langle AA^T y, y \rangle = y^T AA^T y = \|A^T y\|_2^2.$$

Portanto $A^T y = 0$, o que implica que $y \in \mathcal{N}(A^T)$ e assim $\mathcal{R}(A)^\perp \subset \mathcal{N}(A^T)$.

Seja $y \in \mathcal{N}(A^T) \subset \mathbb{R}^m$, então $A^T y = 0$. Logo, para todo $x \in \mathbb{R}^n$, temos que

$$0 = \langle x, A^T y \rangle = y^T Ax = \langle Ax, y \rangle.$$

Isto mostra que $y \in \mathcal{R}(A)^\perp$ e portanto $\mathcal{N}(A^T) \subset \mathcal{R}(A)^\perp$. Logo, $\mathcal{N}(A^T) = \mathcal{R}(A)^\perp$.

Teorema

$$\mathbb{R}^n = S \oplus S^\perp$$

Teorema

$$\mathcal{R}(A)^\perp = \mathcal{N}(A^T) \quad \text{e} \quad \mathcal{N}(A)^\perp = \mathcal{R}(A^T)$$

Teorema

$$\mathbb{R}^n = \mathcal{R}(A^T) \oplus \mathcal{N}(A), \quad \mathbb{R}^m = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{N}(A^T)$$

Lined area for notes or exercises.

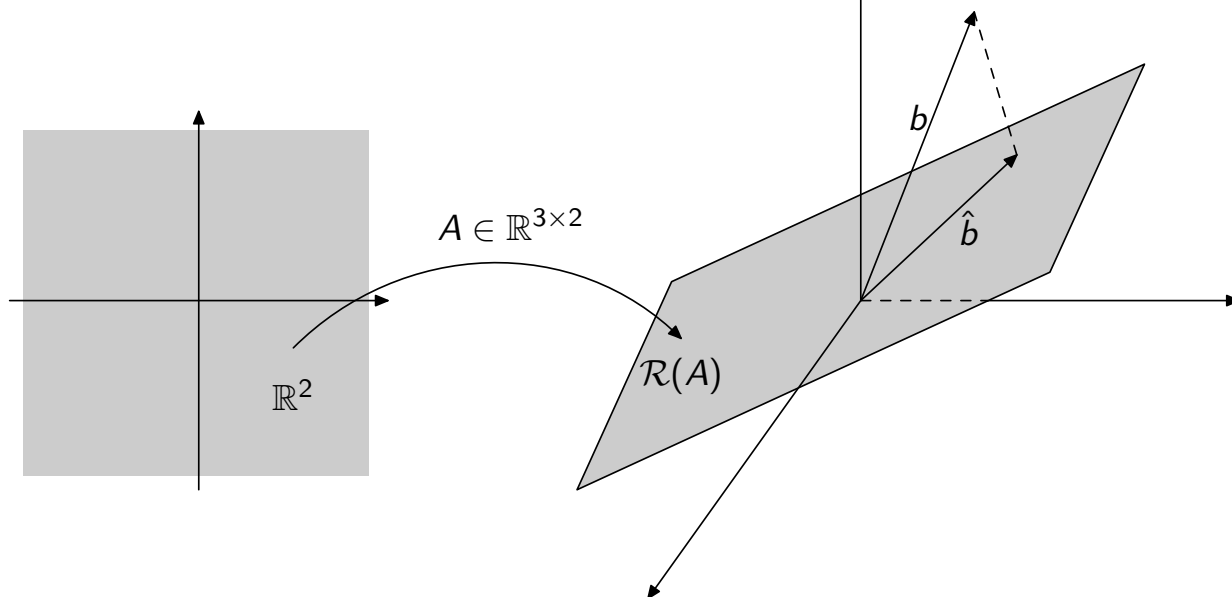
Considere $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $b \in \mathbb{R}^m$.

Como $\mathbb{R}^m = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{N}(A^T)$, $b = Au + v$, com $v \in \mathcal{N}(A^T)$,

$$\|b - Ax\|_2^2 = \|Au + v - Ax\|_2^2 = \|A(u - x) + v\|_2^2 = \|A(u - x)\|_2^2 + \|v\|_2^2$$

Assim, a solução de quadrados mínimos é $x = u$, onde Au é a projeção ortogonal de b em $\mathcal{R}(A)$.

- ▶ $\hat{b} \leftarrow \text{proj}_{\mathcal{R}(A)} b$
- ▶ Resolver $Ax = \hat{b}$



A large area of the page is filled with horizontal lines for writing, with a vertical red margin line on the left side.

Teorema de Pitágoras



Como $\mathbb{R}^m = S \oplus S^\perp$, $b \in \mathbb{R}^m$ pode ser escrito como

$$b = u + v$$

com $u \in S$ e $v \in S^\perp$ com $\langle u, v \rangle = 0$.

Teorema

$$\|u + v\|_2^2 = \|u\|_2^2 + \|v\|_2^2.$$

$$\|u + v\|_2^2 = \langle u + v, u + v \rangle = \langle u, u \rangle + \langle u, v \rangle + \langle v, u \rangle + \langle v, v \rangle = \|u\|_2^2 + \|v\|_2^2$$

A large area of the page is filled with horizontal lines, resembling a notebook page for taking notes. A vertical red line is positioned on the left side of this area.



Teorema

Seja S um subespaço de \mathbb{R}^m . Existe um único $y \in S$ tal que

$$\|b - y\|_2 = \min_{s \in S} \|b - s\|_2.$$

y é tal que $b - y \in S^\perp$, ou seja, y é a projeção ortogonal de b em S .

Sabemos que $b = y + z$, com $y \in S$ e $z \in S^\perp$. y é a projeção ortogonal de b em S ($b - y = z \in S^\perp$). Nenhum outro $w \in S$ tem essa propriedade, pois $b = w + (b - w)$ violaria a unicidade da decomposição de \mathbb{R}^m em soma direta de S e S^\perp . Seja $s \in S$, como $b - s = (b - y) + (y - s)$,

$$\|b - s\|_2^2 = \|b - y\|_2^2 + \|y - s\|_2^2.$$

Portanto, o mínimo é atingido quando $s = y$.

Se x^* é a solução de quadrados mínimos de $Ax = b$,

$$\|b - Ax^*\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2^2 = \min_{s \in \mathcal{R}(A)} \|b - s\|_2^2$$

Então x^* é qualquer solução de $Ax^* = y$, onde y é a projeção ortogonal de b em $\mathcal{R}(A)$. Além disso, $b - Ax^* \in \mathcal{R}(A)^\perp = \mathcal{N}(A^T)$.

Teorema

x é solução de quadrados mínimos de $Ax = b$ se e somente se

$$A^T(b - Ax) = 0 \quad \iff \quad A^T Ax = A^T b \quad (\text{sistema normal})$$

Se $\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(Q)$, então $\mathcal{N}(A^T) = \mathcal{N}(Q^T)$. Assim, x é solução de quadrados mínimos se e somente se $Q^T(b - Ax) = 0$.

Se $A = QR$, então

$$Q^T Ax = Q^T b$$

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

$$Rx = Q^T b$$

$$A = U\Sigma V^T$$

$$Av_i = U\Sigma V^T v_i = U\Sigma \begin{bmatrix} v_1^T v_i \\ v_2^T v_i \\ \vdots \\ v_n^T v_i \end{bmatrix} v_i = U\Sigma \begin{bmatrix} v_1^T v_i \\ v_2^T v_i \\ \vdots \\ v_n^T v_i \end{bmatrix} = U\Sigma e_i = \sigma_i Ue_i = \sigma_i u_i$$

Logo,

$$Av_i = \begin{cases} \sigma_i u_i, & 1 \leq i \leq r \\ 0, & r + 1 \leq i \leq n \end{cases}$$

$$A = U\Sigma V^T$$

$$A^T u_i = V\Sigma^T U^T u_i = V\Sigma^T \begin{bmatrix} u_1^T \\ u_2^T \\ \vdots \\ u_m^T \end{bmatrix} u_i = V\Sigma^T \begin{bmatrix} u_1^T u_i \\ u_2^T u_i \\ \vdots \\ u_n^T u_i \end{bmatrix} = V\Sigma^T e_i = \sigma_i V e_i = \sigma_i v_i$$

Logo,

$$A^T u_i = \begin{cases} \sigma_i v_i, & 1 \leq i \leq r \\ 0, & r+1 \leq i \leq m \end{cases}$$

$$Av_i = \sigma_i u_i, \quad i = 1, 2, \dots, r$$

$$A^T u_i = \sigma_i v_i, \quad i = 1, 2, \dots, r$$

$$Av_i = 0, \quad i = r + 1, \dots, n$$

$$A^T u_i = 0, \quad i = r + 1, \dots, m$$

- ▶ $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ é base ortonormal para \mathbb{R}^n
- ▶ $\{u_1, u_2, \dots, u_m\}$ é base ortonormal para \mathbb{R}^m
- ▶ $\{u_1, u_2, \dots, u_r\}$ é base ortonormal para $\mathcal{R}(A)$,
- ▶ $\{v_1, v_2, \dots, v_r\}$ é base ortonormal para $\mathcal{R}(A^T)$,
- ▶ $\{v_{r+1}, \dots, v_n\}$ é base ortonormal para $\mathcal{N}(A)$,
- ▶ $\{u_{r+1}, \dots, u_m\}$ é base ortonormal para $\mathcal{N}(A^T)$,

$$\dim\{\mathcal{R}(A)\} = r$$

$$\dim\{\mathcal{R}(A^T)\} = r$$

$$\dim\{\mathcal{N}(A)\} = n - r$$

$$\dim\{\mathcal{N}(A^T)\} = m - r$$

$$A = U\Sigma V^T$$

Observe que

$$A^T A = (V\Sigma^T U^T)(U\Sigma V^T) = V(\Sigma^T \Sigma)V^T$$

Logo

$$(A^T A)V = V(\Sigma^T \Sigma) \Rightarrow (A^T A)v_i = \sigma_i^2 v_i$$

- ▶ v_i são autovetores de $A^T A$ associados aos autovalores σ_i^2 , $i = 1, 2, \dots, r$
- ▶ v_i são autovetores de $A^T A$ associados ao autovalor 0, $i = r + 1, \dots, n$



Encontre a decomposição SVD para

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

Os valores singulares são as raízes quadradas dos autovalores de AA^T e $A^T A$. Como entre AA^T e $A^T A$, a primeira tem menor dimensão, vamos começar por aí.

$$AA^T = \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 8 \end{bmatrix}.$$

O polinômio característico para AA^T é $p(\lambda) = (5 - \lambda)(8 - \lambda) - 4 = (\lambda - 9)(\lambda - 4)$. Por tanto, os valores singulares são $\sigma_1 = \sqrt{9} = 3$ e $\sigma_2 = \sqrt{4} = 2$. As colunas de U são autovetores de AA^T , com norma euclidiana unitária. Resolvendo

$$(AA^T - 9I)u_1 = 0, \quad \text{e} \quad (AA^T - 4I)u_2 = 0,$$

descobrimos que

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \text{e} \quad u_2 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Note que como as colunas de U são ortogonais entre si, uma vez descoberta a primeira coluna u_1 , u_2 também já está determinada, a menos de um sinal, dado que $U \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$.

Usando que $A^T u_i = \sigma_i v_i$, descobrimos que $v_1 = \frac{1}{3\sqrt{5}}(5, 2, 4)^T$ e $v_2 = \frac{1}{4\sqrt{5}}(0, 4, -2)^T$. Como v_3 é ortogonal a v_1 e v_2 podemos usar Gram-Schmidt para determiná-lo ou resolver $Av_3 = 0$. De qualquer forma, a solução normalizada é $v_3 = \frac{1}{3}(-2, 1, 2)^T$. Desta forma,

$$A = U\Sigma V^T = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} \frac{1}{3\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 5 & 0 & -2\sqrt{5} \\ 2 & 6 & \sqrt{5} \\ 4 & -3 & 2\sqrt{5} \end{bmatrix}.$$

Se $A = U\Sigma V^T$, veja que

$$\begin{aligned}\|A\|_2 &= \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \max_{x \neq 0} \frac{\|U\Sigma V^T x\|_2}{\|x\|_2} \\ &= \max_{x \neq 0} \frac{\|\Sigma V^T x\|_2}{\|x\|_2} = \max_{V^T x \neq 0} \frac{\|\Sigma V^T x\|_2}{\|V^T x\|_2} \\ &= \max_{y \neq 0} \frac{\|\Sigma y\|_2}{\|y\|_2} = \|\Sigma\|_2 = \sigma_1\end{aligned}$$

Exercício: mostre que a norma-2 de uma matriz diagonal é o maior valor em módulo dos elementos da diagonal da matriz.

$$A = \hat{U}\hat{\Sigma}\hat{V}^T = \begin{bmatrix} \sigma_1 u_1 & \sigma_2 u_2 & \cdots & \sigma_r u_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \\ \vdots \\ v_r^T \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^r \sigma_j u_j v_j^T$$

Exercício: Mostre que se $\|u\|_2 = \|v\|_2 = 1$, então $\|uv^T\|_2 = 1$.

$$A = \begin{bmatrix} 1/3 & 1/3 & 2/3 \\ 2/3 & 2/3 & 4/3 \\ 1/3 & 2/3 & 3/3 \\ 2/5 & 2/5 & 4/5 \\ 3/5 & 1/5 & 4/5 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_1 = 2.599, \quad \sigma_2 = 0.368, \quad \sigma_3 = 1.96 \cdot 10^{-16}$$

Lined area for notes or calculations, featuring a vertical red margin line on the left and horizontal grey lines.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 \\ 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 \\ 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 & 1/10 \\ 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 & 1/10 & 1/11 \end{bmatrix}, \quad a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$$

```
>> for n = 1:16
    R(:,n) = [n; rank(hilb(n))];
endfor
>> R
R =
1  2  3  4  5  6  7  8  9  10 11 12 13 14 15 16
1  2  3  4  5  6  7  8  9  10 10 11 11 11 12 12
```


Matrizes de Hilbert



$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 \\ 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 \\ 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 & 1/10 \\ 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 & 1/10 & 1/11 \end{bmatrix}, \quad a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$$

```
>> A = hilb(6);
>> [U,S,V] = svd(A);
>> s = diag(S)
s =
    1.619e+00    2.424e-01    1.632e-02    6.158e-04    1.257e-05    1.083e-07

>> D = diag([s(1:4) 0 0]);
>> AA = U*D*V';
>> norm(A-AA)
ans = 1.2571e-05
```

$$A = \sum_{j=1}^r \sigma_j u_j v_j^T \approx \sum_{j=1}^k \sigma_j u_j v_j^T = \hat{A}$$

onde k é tal que $\sigma_{k+1} < \epsilon$.

Por exemplo:

```
>> A = hilb(100);  
>> [U,S,V] = svd(A);  
>> s = diag(S)';  
>> N = 18;           # Quantidade de valores singulares a preservar  
>> D = diag(s(1:N));  
>> AA = U(:,1:N) * D * V(:,1:N)';  
>> norm(A-AA)  
ans = 6.1501e-15
```

$$A = \sum_{j=1}^r \sigma_j u_j v_j^T \approx \sum_{j=1}^k \sigma_j u_j v_j^T = \hat{A}$$

onde k é tal que $\sigma_{k+1} < \epsilon$.

Por exemplo:

```
>> A = hilb(100);  
>> [U,S,V] = svd(A);  
>> s = diag(S)';  
>> N = 18;           # Quantidade de valores singulares a preservar  
>> D = diag(s(1:N));  
>> AA = U(:,1:N) * D * V(:,1:N)';  
>> norm(A-AA)  
ans = 6.1501e-15
```

Se $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e $A = U\Sigma V^T$, então

$$\begin{aligned}\|Ax - b\|_2 &= \|U\Sigma V^T x - b\|_2 = \|U(\Sigma V^T x - U^T b)\|_2 \\ &= \|\Sigma V^T x - U^T b\|_2 = \|\Sigma y - c\|_2\end{aligned}$$

onde $y = V^T x$ e $c = U^T b$.

$$\|Ax - b\|_2 = \|\Sigma y - c\|_2, \quad y = V^T x, \quad c = U^T b$$

$$\Sigma y - c = \begin{bmatrix} \sigma_1 y_1 - c_1 \\ \sigma_2 y_2 - c_2 \\ \vdots \\ \sigma_r y_r - c_r \\ -c_{r+1} \\ \vdots \\ -c_n \end{bmatrix}$$

Logo, $\min \|Ax - b\|_2$ é atingido em quando $y_j = c_j/\sigma_j$, $j = 1, \dots, r$.
 y_j , para $r + 1 \leq j \leq n$ estão livres.

SVD e o problema de quadrados mínimos



$$\|Ax - b\|_2 = \|\Sigma y - c\|_2, \quad y = V^T x, \quad c = U^T b$$

$y_j = c_j/\sigma_j, j = 1, \dots, r$. Lembrando do particionamento

$$A = [\hat{U} \tilde{U}] \left[\begin{array}{c|c} \hat{\Sigma} & \mathbf{0} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \hat{V}^T \\ \tilde{V}^T \end{array} \right], \quad c = \begin{bmatrix} \hat{c} \\ \tilde{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{U}^T b \\ \tilde{U}^T b \end{bmatrix}$$

temos que

$$V^T x = y = \begin{bmatrix} \hat{\Sigma}^{-1} \hat{c} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \hat{\Sigma}^{-1} & \\ & \mathbf{0} \end{bmatrix}}_{n \times m} \begin{bmatrix} \hat{U}^T b \\ \tilde{U}^T b \end{bmatrix} = \Sigma^\dagger U^T b$$

