DCC639 - Álgebra Linear Computacional - Prova II

Prof. Alexandre Salles da Cunha e Profa. Ana Paula Couto

06 de Dezembro de 2022

Instruções:

- Leia atentamente este conjunto de instruções antes de iniciar sua prova.
- Esta prova é individual e sem consulta.
- É uma prova discursiva, cabendo ao aluno ser claro, organizado e objetivo na apresentação de sua resolução. Estes aspectos são considerados na correção.
- As quatro questões são igualmente valoradas.
- O uso de calculadora é permitido, desde que não seja uma calculadora disponível no seu telefone celular.
- Esta prova foi revisada diversas vezes, de forma que não há necessidade de consultar os professores para esclarecer qualquer aspecto sobre o enunciado ou sobre os dados das questões. Faz parte da avaliação ser capaz de interpretar as questões propostas.
- Ao final, entregue a folha de almaço com a resolução juntamente com o enunciado das questões. Caso utilizada, a folha de rascunho não deve ser entregue.

Questão 01: Abaixo são apresentadas duas implementações da fatoração QR via Gram-Schmidt: `QR_GS_1(A) e QR_GS_2(A)`. Recordando: As instruções `A(:,k)`,`A(k,:)` respectivamente denotam a $k-$ ésima coluna e linha da matriz A e o comando `size(A)` retorna o número de linhas e colunas de A, nesta ordem. Por sua vez, a transposta de `A` é representada como

```
A'
```

1. (35%) Qual implementação é a revisada ? Justifique distiguindo-a da clássica. (max 3 linhas).
   `QR_GS_1(A)`. Na implementação clássica (`QR_GS_2(A)`), a coluna A_j permanece inalterada até que todas as colunas $q_1, \ldots, q_{j-1}$ de Q sejam calculadas. Na revisada, assim que uma coluna q_j de Q é calculada, as colunas $A_{j+1}, \ldots, A_n$ são modificadas, descontando destas colunas sua projeção em $span\{q_j\}$. Isso pode ser feito pois as colunas de Q são ortogonais.
2. (15%) Elas são matematicamente equivalentes (Sim/Não) ?
   Sim, ambas garantem que $span\{q_1, \ldots, q_i\} = span\{A_1, \ldots, A_i\}$ para todo $i = 1, \ldots, n$.
3. (15%) Elas são numericamente equivalentes (Sim/Não) ?
   Não, produzem resultados numéricos distintos, uma vez que utilizamos aritmética de precisão finita.
4. (35%) Existe alguma vantagem de uma sobre a outra (Sim/Não) ? Justifique (max 5 linhas).
   Sim, a revisada produz melhores resultados numéricos. Sendo $\hat{Q}$ e Q as matrizes produzidas pela revisada e pela clássica, normalmente temos $\|I - Q^T Q\| >> \|I - \hat{Q}^T \hat{Q}\|$. Como há perda de ortogonalidade quando as colunas de Q são calculadas, projetar as colunas de A assim que uma coluna q_k é disponível ajuda a reduzir os erros.

```
function [Q,R] = QR_GS_1(A)
   [m,n] = size(A)
   R = zeros(n,n)
   Q = zeros(m,n)
   V = A
   for i = 1:n
       R(i,i) = norm(V(:,i),2)
       Q(:,i) = V(:,i)/R(i,i)
       for j = (i+1):n
           R(i,j) = Q(:,i)'*V(:,j)
           V(:,j) = V(:,j)-R(i,j)*Q(:,i)
       end
   end
endfunction
```

```
function [Q,R] = QR_GS_2(A)
   [m,n] = size(A)
   R = zeros(n,n)
   Q = zeros(m,n)
   for j = 1:n
       V = A(:,j)
       for i = 1:j-1
           R(i,j) = Q(:,i)'*A(:,j)
           V = V - R(i,j)*Q(:,i)
       end
       R(j,j) = norm(V,2)
       Q(:,j) = 1.0/R(j,j) * V
   end
endfunction
```

Questão 02: Na Fase I dos algoritmos que fatoram $A = QTQ^*$ (A é quadrada, Q unitária), são feitas operações similares em A, de forma a transformá-la em uma forma conveniente para aplicação da fase subsequente, a Fase II, que é o algoritmo QR. Considerando a matriz A identificada abaixo, responda:

1. Qual é a forma da matriz similar a A obtida ao final da Fase I ? Seja o mais específico que puder e justifique (máx. 3 linhas).
   Para uma matriz A qualquer, o resultado é uma Hessenberg superior, isto é, uma matriz que possui elementos não nulos na parte triangular superior e na subdiagonal abaixo da diagonal principal. Para a matriz em questão, a Hessenberg é uma tridiagonal, dado que $A = A^T$.

2. Qual é a forma da matriz T obtida ao final da Fase II ? Seja o mais específico que puder e justifique (máx. 3 linhas).
   Quando A é uma matriz qualquer, a matriz T é triangular superior. No caso em questão, para A simétrica, T é diagonal.

3. Caracterize a primeira transformação similar necessária desta Fase I, calculando as 2 matrizes que devem ser empregadas e como devem ser empregadas.
   Vamos construir uma tranformação similar $Q_1 A Q_1^*$ por meio de uma matriz Q_1 unitária, definida como $Q_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0_3^T \\ 0_3 & F_1 \end{bmatrix}$, onde $F_1 \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ é um refletor de Householder que reflete $x = A(2:4,1)$ em $r = \begin{bmatrix} \sqrt{6} & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$ ou em seu simétrico.

```
-->Q1= eye(4,4);
-->x = A(2:4,1);
-->v = sign(x(1))*norm(x,2)*eye(3,1)+x;
-->F = eye(3,3) - 2 * v * v'/(v' * v);
-->Q1(2:4,2:4) = F;
-->Q1
 Q1  =

   1.   0.           0.           0.
   0.  -0.8164966    0.4082483  -0.4082483
   0.   0.4082483    0.9082483   0.0917517
   0.  -0.4082483    0.0917517   0.9082483
-->A2 = Q1*A*Q1'
 A2  =
   4.          -2.4494897   0.          0.
  -2.4494897   2.8333333   0.4457058   0.7790391
   0.          0.4457058   8.2575679   1.9166667
   0.          0.7790391   1.9166667   0.9090987
```

4. Descreva a Fase II do algoritmo para se obter $A = QTQ^*$ (max 5 linhas).
   Assuma que H seja a matriz produzida na Fase I. A fase II consiste em fazer a fatoração QR de H, isto é $H = QR$. Na sequência, atualizamos a matriz H como $H = RQ$ e repetimos

o processo, até que a parcela de H, abaixo da subdiagonal, seja suficientemente próximo de zero. Assintoticamente, o produto RQ será uma matriz triangular superior (ou diagonal, no caso da matriz A dada).

5. Se A é uma matriz de grande porte, qual é a justificativa para aplicação da Fase I antes do algoritmo QR ? (max 5 linhas).
   São duas justificativas, ambas visando redução do custo computacional. A primeira é reduzir o número de iterações necessárias para que a Fase II produza uma matriz suficientemente triangular. A segunda é permitir que a fatoração QR seja acelerada, explorando a estrutura (tridiagonal, por exemplo) da matriz de entrada da Fase II.

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & -1 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 8 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

Questão 3: Deseja-se ajustar a função $b(x) \approx \alpha + \beta x$ para os dados da tabela abaixo. Sabe-se os coeficientes ótimos α, β do ajuste podem ser calculados resolvendo-se o sistema de Equações Normais, $A^T A\hat{x} = A^T b$, onde $\hat{x}^T = [\alpha \quad \beta]$ e A é obtida a partir dos dados e modelo a serem ajustados.

1. Considerando os dados apresentados na tabela e a fatoração QR de A (isto é, Q, R e $Q^T b$), encontre os valores ótimos α, β.

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

   No desenvolvimento acima, R^{-T} existe, assumindo-se A com posto coluna completo (o caso não completo é tratado na sequência). Portanto, basta resolvermos o sistema triangular superior $R\hat{x} = Q^T b$.

```
R  =
  -2.236068  -3.354102
   0.         0.7905694
QTb  =
  -4.2127521
   0.4016093
-->inv(R)*QTb
 ans  =
   1.122
   0.508
```

2. Justifique o uso do método empregado na questão acima (max 5 linhas).
   A matriz $A^T A$ do sistema de equações normais é usualmente malcondicionada (seu número de condição é muito pior que o de A) e seu cálculo explícito para resolução do problema de Mínimos Quadrados deve ser evitado.

3. Explique como você encontraria α, β ótimos se a matriz A for singular (max. 3 linhas).
   Um caminho é fazer a fatoração SVD de $A = U\Sigma V^T$ e calcular uma solução $\hat{x}$ para o problema de Mínimos Quadrados dada por $\hat{x} = A^+ b = V\Sigma^+ U^T b$.

i	x_i	b_i
1	1.00	1.63
2	1.25	1.76
3	1.50	1.88
4	1.75	2.01
5	2.00	2.14

```
->Q =
  -0.4472136  -0.6324555
  -0.4472136  -0.3162278
  -0.4472136   0.0000000
  -0.4472136   0.3162278
  -0.4472136   0.6324555
->R =
  -2.236068  -3.354102
   0.         0.7905694
->Q'*b =
  -4.2127521
   0.4016093
```

Questão 04: Utilizando a *abordagem inocente* apresentada no curso, realize a fatoração SVD da seguinte matriz, identificando os fatores pertinentes:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 4 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

```
 A  =

   0.   4.
   1.   0.

-->ATA = A'*A
 ATA  =

   1.   0.
   0.   16.

-->[Q,S] = spec(ATA)
 Q  =

   1.   0.
   0.   1.
 S  =

   1.   0.
   0.   16.
```

Invertendo a ordem dos autovalores e autovetores S já que $\sigma_1 \geq \sigma_2$ na fatoração SVD:

```
->S(1,1) = 16;S(2,2)=1
 S  =

   16.   0.
   0.    1.
-->Sigma = sqrt(S)
 Sigma  =

   4.   0.
   0.   1.
-->V(:,1) = Q(:,2);V(:,2) = Q(:,1)
 V  =
   0.   1.
   1.   0.
-->U = A*V
 U  =

   4.   0.
   0.   1.
-->U(:,1) = U(:,1)/Sigma(1,1);
```

```
-->U(:,2) = U(:,2)/Sigma(2,2);
 U  =
   1.   0.
   0.   1.
```