Métodos de ortogonalización

Transformaciones ortogonales

- Métodos de ortogonalización
  Buscamos un método alternativo que evite las dificultades numéricas de las ecuaciones normales
- Necesitamos una transformación numéricamente robusta que produzca un problema más fácil sin cambiar la solución
- ¿Qué tipo de transformación deja la solución de mínimos cuadrados sin cambios?

- $\boldsymbol{Q}$ matriz cuadrada *ortogonal* si $\boxed{\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}}$

- La multiplicación de un vector por una matriz ortogonal preserva la norma Euclídea

$$\|\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v}\|_2^2 = (\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v})^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{v} = \|\boldsymbol{v}\|_2^2$$

- Entonces, multiplicando a ambos lados del problema de mínimos cuadrados por una matriz ortogonal la solución no varía.

Problema de mínimos cuadrados triangular

- Lo simplificamos a un problema de mínimos cuadrado triangular.

- Un sistema triangular sobredeterminados $(m > n)$ de un problema de mínimo cuadrado tiene la forma

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \boldsymbol{x} \cong \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \end{bmatrix}$$

  donde $\boldsymbol{R}$ es $n \times n$ estriangular superior y $\boldsymbol{b}$ se particiona

- El risiduo o error es

$$\|\boldsymbol{r}\|_2^2 = \|\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{R}\boldsymbol{x}\|_2^2 + \|\boldsymbol{b}_2\|_2^2$$

Problema de mínimos cuadrados triangular

- No tenemos el control de $\|\boldsymbol{b}_2\|_2^2$, pero el primer término es cero si $\boldsymbol{x}$ satisface el sistema triangular $n \times n$ t

$$\boldsymbol{Rx} = \boldsymbol{b}_1$$

  que se puede resolver por sustitución hacea atrás

- De donde $\boldsymbol{x}$ es la solución de mínimos cuadrados y mínima suma de cuadrados

$$\|\boldsymbol{r}\|_2^2 = \|\boldsymbol{b}_2\|_2^2$$

- Por lo que nuestra estrategia es transformar el problema general de mínimos cuadrados en el de mínimos cuadrados triangular y utilizar las transformaciones ortogonales que preservan la solución.

Factorización QR

- Dada la matriz $m \times n$ $\boldsymbol{A}$, con $m > n$, buscamos la matriz $m \times m$ ortogonal $\boldsymbol{Q}$ tal que

$$\boxed{\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q} \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix}}$$

con $\boldsymbol{R}$ $n \times n$ y triangular superior

- El problema de mínimos cuadrados lineales $\boldsymbol{Ax} \cong \boldsymbol{b}$ **se** transforma en un problema triangular de mínimos cuadrados

$$\boldsymbol{Q}^T \boldsymbol{Ax} = \boxed{\begin{bmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \boldsymbol{x} \cong \begin{bmatrix} \boldsymbol{c}_1 \\ \boldsymbol{c}_2 \end{bmatrix}} = \boldsymbol{Q}^T \boldsymbol{b}$$

que tiene la misma solución porque

$$\|\boldsymbol{r}\|_2^2 = \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}\|_2^2 = \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{Q} \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \boldsymbol{x}\|_2^2 = \|\boldsymbol{Q}^T \boldsymbol{b} - \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \boldsymbol{x}\|_2^2$$

Bases ortogonales

- Si hacemos lapartición $m \times m$ matriz ortogonal $\boldsymbol{Q} = [\boldsymbol{Q}_1 \ \ \boldsymbol{Q}_2]$, donde $\boldsymbol{Q}_1$ es$m \times n$, entonces

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix} = [\boldsymbol{Q}_1 \ \ \boldsymbol{Q}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix} = \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}$$

  is called *reduced* QR factorization of $\boldsymbol{A}$

- Las columnas $\boldsymbol{Q}_1$ son una base ortonormal de span$(\boldsymbol{A})$, y las columnas de $\boldsymbol{Q}_2$ son base ortonormal de span$(\boldsymbol{A})^{\perp}$

- $\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{Q}_1^T$ es el proyector ortogonal sobre span$(\boldsymbol{A})$

- La solución del problema $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \cong \boldsymbol{b}$ viene dado por el sistema lineal cuadrado

$$\boldsymbol{Q}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c}_1 = \boldsymbol{Q}_1^T\boldsymbol{b}$$

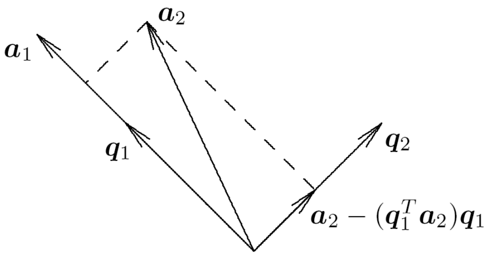
Calculando la factorización QR

- Para calcular la factorización QR de la matriz A de $m \times n$, con $m > n$, transformamos la matriz A en triangular superior

- Similar a la factorización LU por eliminación gaussiana, pero usando transformaciones ortogonales en lugar de matrices de eliminación elementales
  Los métodos disponibles incluyen
-
  - Transformaciones de Householder
  - Rotaciones de Givens
  - Ortogonalización de Gram-Schmidt

Ortogonalización de Gram-Schmidt

- Dados los vectores a1 y a2, buscamos los vectores ortonormales q1 y q2 que generen el mismo subespacio
- Esto se puede lograr restando del segundo vector su proyección sobre el primer vector y normalizando ambos vectores resultantes, como se muestra en el gráfico



Ortogonalización de Gram-Schmidt

- El proceso se puede extender a cualquier número de vectores a1, . . . , ak , ortogonalizando cada vector sucesivo respecto todos los precedentes, dando el procedimiento clásico de Gram-Schmidt

for $k = 1$ **to** n
  $\boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{a}_k$
  for $j = 1$ **to** $k - 1$
    $r_{jk} = \boldsymbol{q}_j^T \boldsymbol{a}_k$
    $\boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{q}_k - r_{jk} \boldsymbol{q}_j$
  end
  $r_{kk} = \|\boldsymbol{q}_k\|_2$
  $\boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{q}_k / r_{kk}$
end

- Resultando $\boldsymbol{q}_k$ and r_{jk} **la factorización reducida QR de A**

Gram-Schmidt Modificado

- El procedimiento clásico de Gram-Schmidt a menudo sufre pérdida de ortogonalidad en aritmética de precisión finita.
- Además, se requiere almacenamiento separado para A, Q y R, ya que se necesitan $\underline{a}_k$ originales en el bucle interno, por lo que qk no puede sobrescribir las columnas de A
- Ambas deficiencias se mejoran mediante el procedimiento de Gram-Schmidt modificado, con cada vector ortogonalizado a su vez respecto a todos los vectores posteriores, por lo que qk puede sobrescribir ak

Factorización Gram-Schmidt QR modificada

- Algoritmo Gram-Schmidt Modificado

for $k = 1$ **to** n
$\quad r_{kk} = \|\boldsymbol{a}_k\|_2$
$\quad \boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{a}_k / r_{kk}$
$\quad$ **for** $j = k+1$ **to** n
$\quad\quad r_{kj} = \boldsymbol{q}_k^T \boldsymbol{a}_j$
$\quad\quad \boldsymbol{a}_j = \boldsymbol{a}_j - r_{kj}\boldsymbol{q}_k$
$\quad$ **end**
end

Ejemplo

Queremos encontrar una función, de algún tipo predefinido, que pase lo mas cerca posible de esos puntos;Por ejemplo, un polinomio de grado 3:

$$ax^3+bx^2+cx+d$$

Para cada punto planteamos la igualdad “deseada”:

para (1,3):

$$a\cdot 1^3+b\cdot 1^2+c\cdot 1+d = 3$$

para (2,-1):

$$a\cdot 2^3+b\cdot 2^2+c\cdot 2+d = -1$$

para (4,7):

$$a\cdot 4^3+b\cdot 4^2+c\cdot 4+d = 7$$

Y así para todos los puntos

Aplicaciones

Versión matricial del sistema de ecuaciones:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 8 & 4 & 2 & 1 \\ 64 & 16 & 4 & 1 \\ 512 & 64 & 8 & 1 \\ 216 & 36 & 6 & 1 \\ 74{,}08 & 17{,}64 & 4{,}2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ 7 \\ 8 \\ 6 \\ -3{,}5 \end{pmatrix}$$

No existe solución para este sistema de ecuaciones (a no ser que la matriz ea singular)

En lugar de buscar “la” solución, buscamos la “mejor” solución posible, la que minimiza $||Ax-b||_2$. ➔ Solución en el sentido de “mínimos cuadrados”.

Este problema se puede resolver con las “ecuaciones normales”: $A^TAx=b$; numéricamente es mejor utilizar la QR.

Aplicaciones

Calculamos en Matlab la QR

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

Q =

  -0.0018   -0.0620    0.5609    0.7647   -0.2769    0.1420
  -0.0142   -0.2094    0.6703   -0.2355    0.6068   -0.2880
  -0.1134   -0.5286    0.1279   -0.2898   -0.6458   -0.4363
  -0.9073    0.3573    0.1507   -0.1254   -0.0858    0.0575
  -0.3828   -0.4941   -0.4407    0.4623    0.3589   -0.2694
  -0.1313   -0.5487    0.0527   -0.2154    0.0427    0.7942


R =

 -564.3138  -76.0356  -10.5902   -1.5507
         0  -13.9558   -5.0058   -1.4855
         0         0    1.1961    1.1218
         0         0         0    0.3609
         0         0         0         0
         0         0         0         0
```

Aplicaciones

Se multiplica b por Q^T

```
>> b1=Q'*b
```

Y se resuelve el sistema triangular:

```
>> sol=R\b1

sol =

   -0.1287
    1.9760
   -7.6248
    8.3838
```

$$= \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}$$

Obtenemos la gráfica del polinomio

$$sol(1)\cdot x^3 + sol(2)\cdot x^2 + sol(3)\cdot x + sol(4)$$

Aplicaciones