5. Ortogonalidad y mínimos cuadrados

5.1. Vectores ortogonales y ortonormales

Dados dos vectores $\mathbf{u}$ y $\mathbf{v}$ de $\mathbb{R}^n$ de componentes u_i y v_i $i = 1, 2, \ldots, n$ respectivamente, el *producto escalar* de ambos se define como

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{n} u_i v_i.$$

Dos vectores se dicen *ortogonales* si su producto escalar es cero, esto es, si $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0$.

La *norma o longitud* de un vector $\mathbf{u}$ se define como

$$\|\mathbf{u}\| = \sqrt{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} u_i^2}$$

Un vector unitario es aquel cuya norma es la unidad, es decir, $\|\mathbf{u}\| = 1$.

Un conjunto $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_p\}$ de vectores de $\mathbb{R}^n$ se dice que forman un *conjunto ortogonal de vectores* si son ortogonales entre sí, esto es, $\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j = 0 \ \forall i \neq \jmath$.

Un conjunto $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_p\}$ de vectores de $\mathbb{R}^n$ se dice que forman un *conjunto ortonormal de vectores* si son un conjunto ortogonal de vectores y todos ellos son unitarios, esto es, de norma igual a la unidad.

El producto escalar se puede calcular a través del producto de matrices, pensando en los vectores como matrices $1 \times n$, de modo que

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u}^T \mathbf{v}.$$

Entonces, con OCTAVE es sencillo de realizar cálculos que involucren estos productos. Además, la función `norm(u)` nos devuelve la norma de un vector `u`.

Ejercicios

1. Decidir si el siguiente conjunto de vectores forma un sistema ortogonal u ortonormal de vectores de $\mathbb{R}^3$

$$\mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix}.$$

2. Decidir si el siguiente conjunto de vectores forma un sistema ortogonal u ortonormal de vectores de $\mathbb{R}^3$

$$\mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{18} \\ 4/\sqrt{18} \\ 1/\sqrt{18} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} -2/3 \\ 1/3 \\ -2/3 \end{bmatrix}.$$

3. Decidir si el siguiente conjunto de vectores forma un sistema ortogonal u ortonormal de vectores de $\mathbb{R}^4$

$$\mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_4 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

5.2. Algoritmo de Gram-Schmidt

Mediante el algoritmo de Gram-Schmidt es posible construir una base ortogonal de un subespacio partiendo de una base cualquiera suya. El algoritmo se basa en la descomposición en componentes ortogonales:

Dados los vectores $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_p\}$ que forman una base de S, definimos

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_1 &= \mathbf{x}_1 \\
\mathbf{v}_2 &= \mathbf{x}_2 - \frac{\mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1}\mathbf{v}_1 \\
\mathbf{v}_3 &= \mathbf{x}_3 - \frac{\mathbf{x}_3 \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1}\mathbf{v}_1 - \frac{\mathbf{x}_3 \cdot \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_2}\mathbf{v}_2 \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
\mathbf{v}_p &= \mathbf{x}_p - \frac{\mathbf{x}_p \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1}\mathbf{v}_1 - \frac{\mathbf{x}_p \cdot \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_2}\mathbf{v}_2 - \ldots - \frac{\mathbf{x}_p \cdot \mathbf{v}_{p-1}}{\mathbf{v}_{p-1} \cdot \mathbf{v}_{p-1}}\mathbf{v}_{p-1}
\end{aligned}$$

entonces, los vectores $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_p\}$ forman una base ortogonal de S.

Ejercicio

1. Definir un conjunto ortogonal que genera el mismo subespacio que el conjunto de vectores

$$\mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

   Verifica la ortogonalidad de los vectores obtenidos.

5.3. Descomposición QR y mínimos cuadrados

El algoritmo de Gram-Schmidt, aplicado a las columnas de una matriz y normalizando los vectores obtenidos, nos perimte factorizar una matriz en la forma QR, como producto de una matriz ortogonal y otra triangular superior e invertible, que es de aplicación en la resolución de los problemas de mínimos cuadrados.

La función de OCTAVE `qr` permite obtener la factorización QR de una matriz A mediante

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

Si A es una matriz $m \times n$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, una *solución por mínimos cuadrados* de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ es una $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$\|\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}\| \leq \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\| \qquad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

El conjunto de soluciones por mínimos cuadrados de $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ coincide con las soluciones del sistema normal

$$A^T A\hat{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b}.$$

Por otra parte, si A admite una descomposición $A = QR$, con Q ortogonal y R triangular superior invertible, para cada $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, la solución por mínimos cuadrados es la solución de

$$R\hat{\mathbf{x}} = Q^T\mathbf{b}$$

Ejercicios

1. Halla la solución en el sentido de mínimos cuadrados de los siguientes sistemas empleando el sistema normal, mediante la descomposición QR y mediante la orden `A\b`

$$a)\ \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -3 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \qquad b)\ \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 8 \\ 2 \end{bmatrix}, \qquad c)\ \left\{ \begin{aligned} x - y &= -1 \\ x + 4y &= 6 \\ x - y &= 5 \\ x + 4y &= 7 \end{aligned} \right.$$