PRÀCTICA 7: MÈTODE DELS MÍNIMS QUADRATS
(Resumen)

APROXIMACIÓ PER MÍNIMS QUADRATS:

En un SI (sistema incompatible) $A * x = b$ sobredimensionat (més equacions que incògnites) anomenem aproximació per mínims quadrats a un vector $x_M \in \mathbb{R}^n$ tal que la distància $||A * x_M - b||$ és mínima[1]. Observa que x_M **no és solució del sistema**, que no existeix. Si haguès solució, aquella distància sería nul.la. Direm error de mínims quadrados a eixa distància[2], $E = ||A * x_M - b||$.

1. **Aproximació per mínims quadrats amb *Scilab*:**

   Com ja es va comentar en la Práctica 1, *Scilab* ens proporciona automàticament una aproximació per mínims quadrats en un sistema incompatible[3] mitjançant

$$x_M = A \backslash b$$

2. **Aproximació per mínims quadrados a partir del sistema d'equacions normals:**

Com els vectors de la forma $A * x$, per a $x \in \mathbb{R}^n$, són els elements del subespai $W = Col(A)$ (Pràctica 6), el vector d'aquests més pròxim a b és la seua projecció[4] b_p sobre W. Així, l'aproximació per mínims quadrats és x_M tal que $A * x_M = b_p$. Donat que $b_\perp = b - b_p \in W^\perp = Col(A)^\perp = \text{kernel}(A')$, resulta

$$A' * (b - b_p) = A' * (b - A * x_M) = 0$$

d'on

$$(A' * A) * x_M = A' * b,$$

és el sistema (**d'equacions normals**) que hem de resoldre per a trobar l'aproximació x_M per mínims quadrats. Qualsevol solució d'aquest sistema, per exemple

$$x_M = (A' * A) \backslash (A' * b)$$

ens proporcionaria la mateixa distància mínima[5] $||A * x_M - b||$.

En resum, pots obtenir l'aproximació per mínims quadrats per ambdós mètodes, 1 ó 2. Quan hi ha més d'una solució; és a dir, quan la matriu $A' * A$ no és invertible, pots obtenir resultats diferents, ambdós correctes. Si te demanem que resolgues el sistema d'equacions normals tindràs que seguir el segon procediment.

APLICACIÓ: RECTA DE MÍNIMS QUADRATS

La recta de mínims quadrats o recta de regressió (en Estadística) proporciona la millor aproximació lineal (en sentit global) a un conjunt de n punts no alineats però que poden seguir una certa tendència lineal. Si els punts són el conjunt

$$S = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots (x_n, y_n)\}$$

---

[1] El mètode té eixe nom perquè amb ell fem mínima la norma d'un vector. Com

$$u = (u_1, u_2, \ldots, u_n) \Longrightarrow ||u|| = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + \cdots + u_n^2},$$

minimitzar la norma significa fer mínima una suma de quadrats.

[2] Es pot demanar també el vector error, $A * x_M - b$.

[3] Podriem assegurar-nos prèviament de que el sistema és SI fent ús de la funció *rank*.

[4] Recorda que $b = b_p + b_\perp$ i que aquests tres vectors formen un triangle rectangle, on $||b_\perp||$ és la distància entre b i b_p (mínima).

[5] En el butlletí s'escriu $Am = A' * A$ i $bm = A' * b$ per a simplificar la notació. També pots resoldre el sistema d'equacions normals fent ús de $rref([Am, bm])$ (Pràctica 1).

es tracta de trobar (Exemple 2 del butlletí) una recta $r(x) = \beta_0 + \beta_1 x$ tal que la distància del vector[6] $r = [r(x_1); r(x_2); \dots; r(x_n)]$ al vector d'ordenades[7] $y = [y_1; y_2; \dots; y_n]$ siga mínima. Fíxat que, si anomenem β al vector $[\beta_0; \beta_1]$, el vector r es pot escriure como $X * \beta$, on

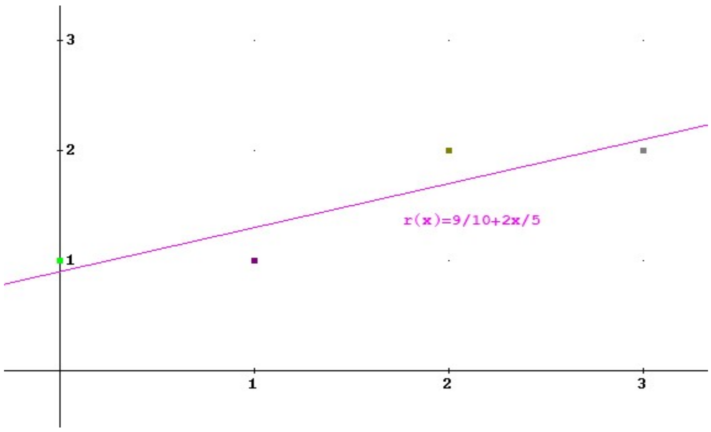
$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}$$

seguint la notació del butlletí. Trobar la recta de mínims quadrats serà trobar l'aproximació per mínims quadrats del sistema $X * \beta = y$.

Amb *Scilab* introduiriem els vectors de dades (columnes) $x = [x_1; x_2; \dots; x_n]$ i $y = [y_1; y_2; \dots; y_n]$ així com la matriu

$$X = [ones(n, 1), x]$$

i trobem $x_M = \beta$ per al sistema $X * \beta = y$, seguint els procediments 1 ó 2. La primera component del resultat serà β_0 i la segona, β_1 i la recta demanada, $r(x) = \beta_0 + \beta_1 x$. L'error residual (en norma) ve donat per $E = norm(X * \beta - y)$. Es important remarcar que si canviem l'ordre dels paràmetres de la recta i la escribim en la forma $r(x) = \beta_0 x + \beta_1$ hauriem de permutar les columnes de la matriu X per a plantejar el sistema correctament.



En el gràfic anterior apareixen els quatre punts i la recta de mínims quadrats que correspon a l'Exemple 2 del butlletí.

CASOS MÉS GENERALES

En el butlletí es tracta el cas més general en el qual el conjunt de punts donat pot seguir tendències no lineals i és més pràctic intentar aproximacions mitjançant altre tipus de corbes, siguen paràbolrs, sinusoides/cosinusoides (Exemple 4) o qualsevol altra. El procediment és el mateix que per a una recta encara que si hi ha més paràmetres a determinar, la matriu X tindrà més columnes. Tot dependrà de la forma de la funció ajust. Fíxat en el text i en els exemples resolts allí amb *Scilab.*

Per exemple, si considerem de nou

$$S = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots (x_n, y_n)\}$$

i pensem que es poden distribuir de forma parabòlica (Exemple 3), cercarem una parábola, $p(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$ tal que la distància del vector $p = [p(x_1); p(x_2); \dots; p(x_n)]$ al vector d'ordenades $y = [y_1; y_2; \dots; y_n]$ siga mínima. Si anomenem ara β al vector $[\beta_0; \beta_1; \beta_2]$, el vector p es pot escribiure como $X * \beta$, on

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{pmatrix}$$

[6] El vector format pels punts de la recta que corresponen a les abscisses x_i.

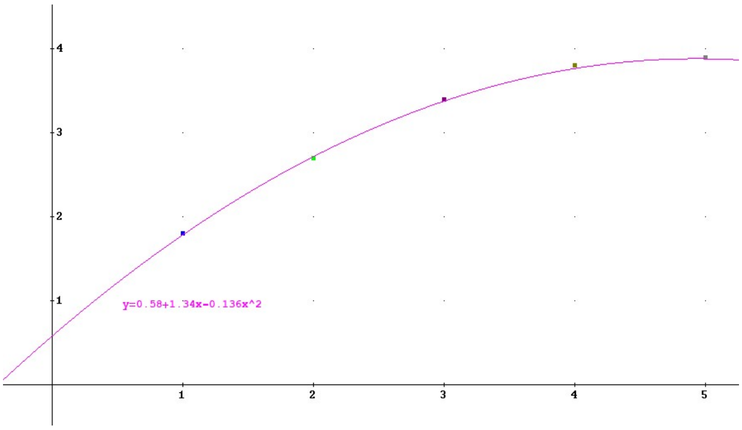
[7] Les ordenades del conjunt de punts S.

i trobar la paràbola de mínims quadrats serà aproximar per mínims quadrats el sistema $X * \beta = y$.

Amb *Scilab,* introduiriem (com abans) els vectors de dades (columnes), $x = [x_1; x_2; \ldots; x_n]$ i $y = [y_1; y_2; \ldots; y_n]$ així com la matriu

$$X = [ones(n, 1), x, x\hat{\ }2]$$

i trobem $x_M = \beta$ per al sistema $X * \beta = y$, seguint els procediments 1 ó 2. La primera component del resultat serà β_0, la segona, β_1 i la tercera, β_2.La paràbola demanada, $r(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$. L'error residual, com abans, serà $E = norm(X * \beta - y)$. Com en el cas de la recta, el canvi d'ordre dels paràmetres de la paràbola implicaria permutar les columnes de la matriu X.



En la gràfica anterior apareixen els punts i la paràbola d'ajust mínim per a l'Exemple 3 del butlletí.