Métodos Numéricos II

Segundo de Grado en Matemáticas, Curso 2018/19

Facultad de Ciencias de la Universidad de Málaga
Dpto. de Análisis Matemático, Estadística e Investigación Operativa, y Matemática Aplicada
Profs. Francisco José Palma Molina (Área de Conocimiento de Matemática Aplicada)

Técnicas de mínimos cuadrados.

Se considera el sistema lineal $A\,X = B$, donde los datos del problema son la matriz $A \in \mathcal{M}_{m\times n}(\mathbb{R})$ y $B \in \mathbb{R}^m$, y la incógnita es $X \in \mathbb{R}^n$. Suponemos que $m \geq n$ (el sistema está sobredeterminado) por lo que $\mathrm{r}(A) \leq n$ (usualmente $\mathrm{r}(A) = n$).

Evidentemente puede ocurrir que $\mathrm{r}(A) < \mathrm{r}(A|B)$, con lo que el sistema es incompatible. En cualquier caso, siempre que sea compatible, es decir, siempre que $\mathrm{r}(A) = \mathrm{r}(A|B)$, notaremos por $\bar{X} \in \mathbb{R}^n$ su solución (que sería única si $\mathrm{r}(A) = n$ y no única si $\mathrm{r}(A) < n$).

Como suele ser usual, para cada $X \in \mathbb{R}^n$, consideramos el vector (función) residuo

$$R(X) = R_X = B - A\,X \in \mathbb{R}^m\,;$$

resulta evidente que $R(\bar{X}) = 0$ y que, recíprocamente cualquier $X \in \mathbb{R}^n$ tal que $R(X) = 0$ es solución del sistema planteado.

El objetivo perseguido es buscar, en el caso de que el sistema sea incompatible, la mejor solución posible.

Definimos la función

$$\begin{array}{rcl} J\colon \mathbb{R}^n & \to & [0,\infty) \\ X & \mapsto & J(X) = \|R(X)\|_2^2\,; \end{array}$$

es inmediato comprobar que la función J está bien definida y que en el caso de que el sistema tenga solución (no necesariamente única) $\bar{X} \in \mathbb{R}^n$, entonces $J(\bar{X}) = 0$, siendo además $\bar{X}$ mínimo de de J.

En el caso de que el sistema sea incompatible, pero exista $\tilde{X} \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$J(\tilde{X}) = \min_{X\in\mathbb{R}^n} J(X)\,,$$

diremos que $\tilde{X}$ es la mejor solución posible en el sentido de mínimos cuadrados del sistema $A\,X = B$.

En cualquier caso nos interesamos por los mínimos de la función J; se tiene que

$$J(X) = \sum_{i=1}^{m} \left(b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{i,j}\,x_j \right)^2\,,$$

por lo que es una función regular". En consecuencia

$$\frac{\partial\,J(X)}{\partial\,x_k} = -2\sum_{i=1}^{m} \left(b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{i,j}\,x_j \right) a_{i,k}\,, \quad k = 1,2,\ldots,n\,.$$

Sabemos que los posibles extremos de J deben verificar que $\nabla\,J(X) = 0$ y se comprueba fácilmente que

$$\nabla\,J(X) = 0 \iff A^t\,A\,X = A^t\,B\,;$$

es decir, los posibles extremos de J deben ser solución de ese sistema lineal, que es de n ecuaciones con n incógnitas.

Por otro lado

$$\frac{\partial^2\,J(X)}{\partial\,x_l\,\partial\,x_k} = 2\sum_{i=1}^{m} a_{i,l}\,a_{i,k}\,,$$

de donde se obtiene que

$$H\,J(X) = 2\,A^t\,A\,.$$

Recordamos que dada $A \in \mathcal{M}_{m\times n}(\mathbb{R})$, con $m \geq n$, la matriz $A^t\,A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ es simétrica y definida no negativa, ya que para todo $X \in \mathbb{R}^n$ se tiene que

$$X^t\,A^t\,A\,X = \langle A\,X, A\,X\rangle \geq 0\,.$$

Además, si $\mathrm{r}(A) = n$, entonces $A^t\,A$ es definida positiva, ya que si $A\,X = 0$ con $X \neq 0$ entonces dicho sistema homogéneo tendría solución no trivial, lo que contradice el que $\mathrm{r}(A) = n$.

Recopilando todos los datos, la matriz hessiana de la función J es siempre definida no negativa (independientemente de $X \in \mathbb{R}^n$, lo que implica que la función J es convexa y que sus posibles extremos son siempre mínimos.

Sabemos también que si $\mathrm{r}(A) = n$, entonces $A^t\,A$ es definida positiva, por lo que es inversible, luego el sistema

$$A^t\,A\,X = A^t\,B$$

tiene solución única; además J es estrictamente convexa, por lo que esa solución única es mínimo global estricto de J. Hemos probado la existencia y unicidad de la mejor solución posible en el sentido de mínimos cuadrados para el caso de que $\mathrm{r}(A) = n$.

Ejercicio. Demostrar que el sistema

$$A^t\,A\,X = A^t\,B$$

siempre es compatible, lo que implica la existencia siempre de solución del sistema en el sentido de mínimos cuadrados.