Métodos Numéricos
Primer Cuatrimestre 2020
Práctica 8
Cuadrados Mínimos Lineales

DEPARTAMENTO DE COMPUTACION
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA

1. ¿Cuál es el punto del plano $x + y - z = 0$ más cercano al punto $(2, 1, 0)$? Plantear las ecuaciones normales que resuelven este problema y hallar la solución.

2. Sean $a, b \in \mathbb{R}^n$ fijos. ¿Qué número real t hace que $\|a - tb\|_2$ sea mínimo?

3. Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$.
Se define el *espacio columna* de A como el subespacio de $\mathbb{R}^m$ generado por las columnas de A, y el *espacio fila* de A como el subespacio de $\mathbb{R}^n$ generado por las filas de A.

    a) Probar que el *espacio columna* de A es $Im(A)$.
    b) Probar que el *espacio fila* de A es $Nu(A)^\perp$.
    c) Probar que $Im(A)^\perp = Nu(A^t)$.

4. Sean $u, v \in \mathbb{R}^n$. Probar que $u \perp v \implies \|u + v\|_2^2 = \|u\|_2^2 + \|v\|_2^2$ (Teorema de Pitágoras)

5. Sea un subespacio $S \subseteq \mathbb{R}^m$, y sea P una proyección ortogonal sobre S.
Probar que $(I - P)x \in S^\perp \quad (\forall x \in \mathbb{R}^m)$

6. Sea un subespacio $S \subseteq \mathbb{R}^m$, $b \in \mathbb{R}^m$ e y es la proyección ortogonal de b sobre S.

    a) Probar que $b - y \in S^\perp$.
    b) Usar Pitágoras para verificar que y es el único vector en S tal que
    $$\|b - y\|_2 = \min_{s\in S} \|b - s\|_2$$

7. Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$.

    a) Probar que x^* es tal que $\|b - Ax^*\|_2 = \min\{\|b - Aw\|_2 : w \in \mathbb{R}^n\}$ si y sólo si $b - Ax^* \in Im(A)^\perp$.
    b) Usar el item anterior para demostrar que $x \in \mathbb{R}^n$ resuelve el problema de cuadrados mínimos para el sistema $Ax = b$ si y sólo si $A^tAx = A^tb$ (ecuaciones normales).

8. Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$. Probar que x_2 es solución de cuadrados mínimos para $Ax = b$ si y sólo si x_2 es solución del sistema
$$\begin{pmatrix} I & A \\ A^t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}$$

9. Supongamos que $Ax = y$. Probar que un vector $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$ satisface $A\hat{x} = y$ si y sólo si $x - \hat{x} \in Nu(A)$. Demostrar que el problema de cuadrados mínimos tiene solución única si y sólo si $Nu(A) = \{0\}$.

10. Consideremos el sistema $Ax = b$, donde $A \in \mathbb{R}^{n\times 2}$, tal que
$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ \vdots \\ 3 \end{bmatrix}$$

a) ¿Se pueden utilizar las ecuaciones normales?

b) Mostrar algún $x_0 \in Nu(A)$.

c) Encontrar la solución de $Ax = b$ 'a mano', y verificar que es una solución del problema de cuadrados mínimos.

d) ¿Es ésta solución única?

11. Sean α y β los parámetros obtenidos por cuadrados mínimos para la aproximación por una recta $y = \alpha x + \beta$ al conjunto de mediciones $\{(x_i, y_i)\}_{i=1\ldots n}$. Demostrar:

   a) El punto $(\bar{x}, \bar{y})$ pertenece a la recta de cuadrados mínimos, donde $\bar{x}$ representa el promedio de los valores $\{x_i\}$.

   b) Si $\alpha = 0$, entonces la mejor aproximación (en el sentido de cuadrados mínimos) por una función constante $f(x) = \beta$ al conjunto de datos $\{y_i\}_{i=1\ldots n}$ es su promedio $\beta = \frac{y_1+\ldots+y_n}{n}$

   c) La suma total de los errores cometidos en la estimación es cero (siendo el error total $\sum_i e_i$, con $e_i = \hat{y}_i - y_i$ el error de la i-ésima estimación, y $\hat{y}_i = \alpha x_i + \beta$).

   d) Si se multiplican los valores de x_i por c, entonces α se multiplica por $1/c$.

   e) Si se multiplican los valores de x_i por c, entonces β no se modifica.

   f) Si se multiplican los valores de y_i por d, entonces α se multiplica por d.

   g) Si se multiplican los valores de y_i por d, entonces β se multiplica por d.

12. La recta $y(x) = \alpha + \beta x$ debe ajustarse a los siguientes datos:

x_i	-2	-1	0	1	2
y_i	0,5	0,5	2	3,5	3,5

   Determinar α y β de modo que $\sum_{i=1}^{5}(y(x_i) - y_i)^2$ sea mínima.

13. Encontrar los polinomios de cuadrados mínimos de grados 1, 2, 3 y 4 para los datos de la siguiente tabla:

x_i	0	0,15	0,31	0,5	0,6	0,75
y_i	1,0	1,004	1,031	1,117	1,223	1,422

   ¿Con cuál grado se obtiene la mejor aproximación de cuadrados mínimos (es decir, la de menor error)?

14. Obtener el plano de cuadrados mínimos para la siguiente tabla:

x	-1	-1	0	0	1	2	2	2
y	-1	0	0	1	0	0	-1	1
f	-4	-2	21,6	-7,3	-5,2	2	0	3

15. Ajustar una curva de la forma ae^{mx} a los siguientes datos:

x	1,2	2,8	4,3	5,4	6,8	7,9
y	2,1	11,5	28,1	41,9	72,3	91,4

16. Sea la matriz A y el vector b:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

a) Obtener la solución de cuadrados mínimos del sistema $Ax = b$ en función de ϵ usando las ecuaciones normales.

b) Resolver las ecuaciones normales asumiendo que $\epsilon = 10^{-3}$ y usando aritmética de punto flotante con 6 dígitos significativos.

c) Calcular ahora la solución de cuadrados mínimos para $\epsilon = 10^{-3}$ con aritmética de punto flotante con 6 dígitos significativos pero utilizando el método QR.

17. Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$.

    a) Probar que A^tA es semidefinida positiva[1].

    b) Si $m < n$ demostrar que A^tA no es definida positiva.

    c) Si $m \geq n$ demostrar que A^tA es definida positiva si y sólo si A tiene rango máximo.

18. Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$. Demostrar que si las columnas de A son linealmente independientes la proyección ortogonal Pb de b sobre el espacio columna de A está dado por la siguiente expresión $Pb = A(A^tA)^{-1}A^tb$.

19. Sea $A{=}U\Sigma V^T$ la descomposición SVD de $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ con $rg(A) = r$, $b \in \mathbb{R}^m$, $u_1, \ldots, u_m$ las columnas de U y $v_1, \ldots, v_n$ las columnas de V. Demostrar:

    a) $\min_x \|Ax - b\|_2^2 = \sum_{i=r+1}^{m} (u_i^tb)^2$

    b) La solución de cuadrados mínimos x^* tal que $\|x\|_2$ es mínima es: $x^* = \sum_{i=1}^{r} \frac{u_i^tb}{\sigma_i}\, v_i$

20. Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ con $m > n$ y $rg(A) < n$ y sea $b \in \mathbb{R}^m$. La solución de cuadrados mínimos para el sistema $Ax = b$ entonces no es única. Un remedio frecuentemente usado en la práctica para obtener una solución única en detrimento de otras, es transformar el problema original en uno en el que la matriz tenga rango máximo. Una de las reformulaciones posibles, para un $x_0 \in \mathbb{R}^n$ y $\mu \in \mathbb{R}_{>0}$ tiene la forma:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2 + \mu\|x - x_0\|_2^2 \tag{1}$$

    Ésta puede ser expresada como un problema de cuadrados mínimos ordinario, pero en el que la matriz tiene rango máximo.

    a) Encontrar la matriz B y el vector c, junto con sus dimensiones, de modo que el problema de encontrar un mínimo para $\|Ax-b\|_2^2+\mu\|x-x_0\|_2^2$ sea equivalente a encontrar $\min_y \|By-c\|_2^2$.

    b) Demostrar que la solución $\mathbf{x}_{\text{cm}}$ de cuadrados mínimos para la reformulación (1) es

$$\mathbf{x}_{\text{cm}} = x_0 + (A^tA + \mu I)^{-1}(A^t\, r(x_0)) = x_0 + \sum_{k=1}^{n} v_k\, \frac{\sigma_k}{\sigma_k^2 + \mu}\, u_k^t\, r(x_0)$$

    siendo $r(x) = b - Ax$ el residuo, u_k y v_k las k-ésimas columnas de U y V respectivamente, y σ_k el k-ésimo valor singular de la descomposición SVD de A.

[1] $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ se dice *semidefinida positiva* si $0 \leq x^tAx \quad (\forall x \neq 0)$

Resolver en computadora

I Sean las matrices A_1 y A_2, y sea el vector b:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 0 & 1 & 6 \\ 3 & 2 & 4 \\ 2 & 5 & 5 \end{pmatrix} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ -1 & 1 & 2 \\ 3 & 5 & 2 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Para cada matriz A_i, se pide:

a) Calcular la factorización QR.

b) Determinar el rango de la matriz R.

c) Utilizando la factorización QR hallada, indicar cuántas soluciones de cuadrados mínimos existen para el sistema $Ax = b$, caracterizarlas, y dar una de ellas.

II *a*) Resolver el siguiente problema de cuadrados mínimos:

$$\begin{pmatrix} 0{,}16 & 0{,}10 \\ 0{,}17 & 0{,}11 \\ 2{,}02 & 1{,}29 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0{,}26 \\ 0{,}28 \\ 3{,}31 \end{pmatrix}$$

b) Ahora resolver el mismo sistema pero con una perturbación en el RHS (*right-hand side*):

$$b = \begin{pmatrix} 0{,}27 \\ 0{,}25 \\ 3{,}33 \end{pmatrix}$$

c) Comparar los resultados de los 2 items anteriores. ¿Puede explicar la diferencia?

Funciones útiles

- Usando *Numpy* para *Python*, se puede resolver el problema de cuadrados mínimos mediante *SVD* usando la siguiente instrucción[2]

```
import numpy as np
x, residuals, rank, s = np.linalg.lstsq(A, b)
```

Donde x es la solución de cuadrados mínimos para el sistema $Ax = b$, *residuals* es la norma dos al cuadrado de $b - Ax$, *rank* es el rango de la matriz A, y s son los valores singulares de A, calculados durante la resolución.

- En *MATLAB*, usando el operador para resolver sistemas lineales[3], en el caso de que el sistema no sea compatible, se devuelve la solución de cuadrados mínimos. Es decir, basta hacer:

```
x = A\B
```

También es posible usar el método QR[4], que también devuelve la solución de cuadrados mínimos si el sistema no tiene una:

```
x = lsqr(A,b)
```

[2] `http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.linalg.lstsq.html:`
[3] `http://www.mathworks.com/help/matlab/ref/mldivide.html`
[4] `http://www.mathworks.com/help/matlab/ref/lsqr.html`

Referencias

[1] Michael T. Heath. *Scientific Computing An Introductory Survey.* The McGraw-Hill, 1997.

[2] C. Meyer. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra.* Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.

[3] D.S. Watkins. *Fundamentals of Matrix Computations.* Pure and Applied Mathematics: A Wiley Series of Texts, Monographs and Tracts. Wiley, 2010.