# Métodos Numéricos
# Modalidad virtual por pandemia COVID-19

DEPARTAMENTO DE COMPUTACION

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA

Primer Cuatrimestre 2020

# Cuadrados Mínimos Lineales

Dado un conjunto de pares ordenados de valores $(x_i, y_i)$ para $i = 1, \ldots, m$, buscamos una función $f(x)$ perteneciente a una familia $\mathcal{F}$ tal que "mejor aproxime" a los datos.
¿Cómo podemos expresar matemáticamente "mejor aproxime"?

- $\min\limits_{f \in \mathcal{F}} \max\limits_{i=1,\ldots,m} |f(x_i) - y_i|$

# Cuadrados Mínimos Lineales

Dado un conjunto de pares ordenados de valores $(x_i, y_i)$ para $i = 1, \ldots, m$, buscamos una función $f(x)$ perteneciente a una familia $\mathcal{F}$ tal que "mejor aproxime" a los datos.
¿Cómo podemos expresar matemáticamente "mejor aproxime"?

- $\min_{f \in \mathcal{F}} \max_{i=1,\ldots,m} |f(x_i) - y_i|$
- $\min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{i=1}^{m} |f(x_i) - y_i|$

# Cuadrados Mínimos Lineales

Dado un conjunto de pares ordenados de valores $(x_i, y_i)$ para $i = 1, \ldots, m$, buscamos una función $f(x)$ perteneciente a una familia $\mathcal{F}$ tal que "mejor aproxime" a los datos.
¿Cómo podemos expresar matemáticamente "mejor aproxime"?

- $\displaystyle \min_{f \in \mathcal{F}} \max_{i=1,\ldots,m} |f(x_i) - y_i|$
- $\displaystyle \min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{i=1}^{m} |f(x_i) - y_i|$
- $\displaystyle \min_{f \in \mathcal{F}} \sum_{i=1}^{m} (f(x_i) - y_i)^2$

# Cuadrados Mínimos Lineales

Dado un conjunto de pares ordenados de valores $(x_i, y_i)$ para $i = 1, \ldots, m$, buscamos una función $f(x)$ perteneciente a una familia $\mathcal{F}$ tal que "mejor aproxime" a los datos.
¿Cómo podemos expresar matemáticamente "mejor aproxime"?

- $\min\limits_{f \in \mathcal{F}} \max\limits_{i=1,\ldots,m} |f(x_i) - y_i|$
- $\min\limits_{f \in \mathcal{F}} \sum\limits_{i=1}^{m} |f(x_i) - y_i|$
- $\min\limits_{f \in \mathcal{F}} \sum\limits_{i=1}^{m} (f(x_i) - y_i)^2$ $\leftarrow$ Método de mínimos cuadrados

# Cuadrados Mínimos Lineales

**Ejemplo 1**

$$\mathcal{F} = \{f(x) : f(x) = ax + b\}$$

$$\min_{f\in\mathcal{F}} \sum_{i=1}^{m}(f(x_i) - y_i)^2 = \min_{f(x)=ax+b} \sum_{i=1}^{m}(ax_i + b - y_i)^2$$

**Ejemplo 2**

$$\mathcal{F} = \{f(x) : f(x) = be^{ax}\}$$

$$\min_{f\in\mathcal{F}} \sum_{i=1}^{m}(f(x_i) - y_i)^2 = \min_{f(x)=be^{ax}} \sum_{i=1}^{m}(be^{ax_i} - y_i)^2$$

# Cuadrados Mínimos Lineales

Dada un conjunto de funciones $\{\phi_1, \ldots \phi_n\}$ linealmente independientes, definimos $\mathcal{F} = \{f(x) = \sum_{j=1}^{n} c_j\phi_j\}$.
El problema de Cuadrados mínimos lineales (CML) es:

$$\min_{f\in\mathcal{F}} \sum_{i=1}^{m} (f(x_i) - y_i)^2 = \min_{c_1,\ldots,c_n} \sum_{i=1}^{m} (\sum_{j=1}^{n} c_j\phi_j(x_i) - y_i)^2$$

# Cuadrados Mínimos Lineales

Sean $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $b \in R^m$ y $x \in \mathbb{R}^n$ definidos como

$$A = \begin{bmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \cdots & \phi_n(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \cdots & \phi_n(x_2) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \phi_1(x_m) & \phi_2(x_m) & \cdots & \phi_n(x_m) \end{bmatrix} \; b = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \; x = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$

El problema de Cuadrados Mínimos Lineales se formula como

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2$$

Como $Im(A) \oplus Nucleo(A^t) = \mathbb{R}^m$, entonces $b = b^1 + b^2$ con $b^1 \in Im(A)$ y $b^2 \in Nucleo(A^t)$

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2 = \min_{y \in Im(A)} ||y - b||_2^2$$

$$||y - b||_2^2 = ||y - b^1 - b^2||_2^2 = ||b||_2^2 - 2y^t b^1 + ||y||_2^2$$

Buscamos el mínimo de $g(z) : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ tal que

$$g(z) = ||b||_2^2 - 2z^t b^1 + ||z||_2^2$$

# Cuadrados Mínimos Lineales

$$\min g(z) = ||b||_2^2 - 2z^t b^1 + ||z||_2^2$$

Aplicamos condición de primer y segun orden:

$$\nabla(g) = -2b_1 + 2z = 0 \Rightarrow z = b_1$$

$$H_g(z) = 2I$$

Como $H_g(z)$ es definida positiva, el punto crítico es mínimo.
Entonces $x^* \in \mathbb{R}^n$ es solución de cuadrados mínimos lineales si

$$Ax^* = b^1$$

# Cuadrados Mínimos Lineales

El problema de Cuadrados Mínimos Lineales simpre tiene solución ya que $b^1 \in Im(A)$.

La solución es única $\Leftrightarrow$ las columnas de $A$ son linealmente independientes.

Si $x^* \in R^n$ es solución y $r = b - Ax^*$ entonces

$$A^t r = 0$$

$$A^t A x^* = A^t b$$

(ecuaciones normales)

Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ con $rango(A) = n$. Entonces $A^tA$ es inversible y la solución de MCL es $x^* = (A^tA)^{-1}A^tb$

Sea $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ con $rango(A) = n$. Sean $b, \bar{b} \in \mathbb{R}^m$ y $b^1, \bar{b}^1$ las proyecciones en $Im(A)$. Si $b^1 \neq 0$ entonces

$$\frac{||(A^tA)^{-1}A^tb - (A^tA)^{-1}A^t\bar{b}||_2}{||(A^tA)^{-1}A^tb||_2} \leq \chi(A)\frac{||b^1 - \bar{b}^1||_2}{||b^1||_2}$$

donde $\chi(A) = ||A||_2||(A^tA)^{-1}A^t||_2$

Propiedad: $\chi(A)^2 = \chi(A^tA)$ usando $||.||_2$

# Cuadrados Mínimos Lineales

## Usando QR-$rango(A) = n$

Sean $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $rango(A) = n$, $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ matriz ortogonal y $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ triangular superior con $rango(R) = n$ tal que

$$A = Q^t \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} ||QAx - Qb||_2^2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Rx - b^{(n)}||_2^2 + ||b^{(m-n)}||_2^2$$

con $Qb = (b^{(n)}, b^{(m-n)})$

$$\boxed{\text{Solución } x^* = R^{-1} b^{(n)}}$$

# Cuadrados Mínimos Lineales

## Usando QR-$rango(A) < n$

Sean $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $rango(A) = r < n$, $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ matriz ortogonal y $R_1 \in \mathbb{R}^{r\times r}$ triang superior con $rango(R_1) = r$, $R_2 \in \mathbb{R}^{r\times(n-r)}$ tal que

$$\bar{A} = Q^t \begin{bmatrix} R_1 & R_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

con $\bar{A} = AP$ con $P$ matriz de permutación. Definiendo $P\bar{x} = x$

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2 = \min_{\bar{x}\in\mathbb{R}^n} ||\bar{A}\bar{x} - b||_2^2 = \min_{\bar{x}\in\mathbb{R}^n} ||Q\bar{A}\bar{x} - Qb||_2^2$$

$$\min_{\bar{x}\in\mathbb{R}^n} ||\bar{A}\bar{x} - b||_2^2 = \min_{\bar{x}\in\mathbb{R}^n} ||R_1\bar{x}^r + R_2\bar{x}^{n-r} - b^r||_2^2 + ||b^{m-r}||_2^2$$

con $Qb = (b^{(r)}, b^{(m-r)})$

$$\boxed{\text{Soluciones: } R_1\bar{x}^{*r} + R_2\bar{x}^{*n-r} = b^r}$$

## Usando SVD

Sean $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $rango(A) = r < n$, $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ matriz ortogonal, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matriz ortogonal y $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ tal que

$$A = U \Sigma V^t$$

con $\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma^1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma^r & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$ $\sigma^1 \geq \sigma^2 \geq, \ldots, \geq \sigma^r > 0$

# Cuadrados Mínimos Lineales

## Usando SVD

$$A = U\Sigma V^t$$

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} ||U^t Ax - U^t b||_2^2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} ||\Sigma V^t x - U^t b||_2^2$$

definiendo $y = V^t x$

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2 = \min_{y\in\mathbb{R}^n} ||\Sigma y - U^t b||_2^2$$

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} ||Ax - b||_2^2 == \min_{y\in\mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^{r} (\sigma^i y_i - (U^t b)_i)^2 + \sum_{i=r+1}^{m} ((U^t b)_i)^2$$

$$y_i^* = \frac{(U^t b)_i}{\sigma^i} \; \forall i = 1, \ldots, r \quad y_i^* \text{ cualquier valor } \forall i = r+1, \ldots, n$$

$$\boxed{\text{Soluciones: } x^* = Vy^*}$$