

Sistemas lineales

Un sistema lineal de $n \times n$ consiste de n ecuaciones con n incógnitas.

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n \end{cases}$$

También se puede expresar en forma matricial como $Ax = b$ donde:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

Dados los coeficientes A y el término independiente b nos interesa encontrar la solución al sistema, es decir todos los $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ax = b$ (puede no haber solución).

Imagen

Definimos la imagen de $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ como:

$$Im(A) = \{y \in \mathbb{R}^n \mid \exists x \in \mathbb{R}^n, Ax = y\}$$

La $Im(A)$ son todas las posibles combinaciones lineales de las columnas de A .

Cuándo hay solución?

Si interpretamos el sistema de ecuaciones de manera geométrica, por ejemplo con $n = 2$, tenemos 2 ecuaciones donde cada una define una recta. Lo que buscamos al resolver el sistema es encontrar todos los puntos donde se intersecan dichas rectas. Con esta interpretación, definimos:

- **Sistema incompatible:** no hay solución (las rectas son paralelas sin intersección).
- **Sistema compatible determinado:** hay una única solución (las rectas intersecan en un único punto).
- **Sistema compatible indeterminado:** hay infinitas soluciones (las rectas intersecan en infinitos puntos, son la misma recta).

Esta interpretación se extiende a \mathbb{R}^n donde las ecuaciones definen hiper-planos.

Para un sistema $Ax = b$ cualquiera:

- Si $b \notin Im(A)$ entonces el sistema **no** tiene solución.
- Si $b \in Im(A)$ entonces el sistema tiene solución. La solución es única sii las columnas de A son linealmente independientes. En ese caso, la matriz A resulta inversible y por lo tanto $Ax = b \iff x = A^{-1}b$. Hay una biyección entre x y b , necesariamente hay un único x tal que $Ax = b$.

Sistemas equivalentes

Sean $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $a \in \mathbb{R}^n$, $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$. Dados 2 sistemas lineales $Ax = a$ y $Bx = b$, decimos que son equivalentes sii tienen el mismo conjunto de soluciones. Es decir, para todo $x \in \mathbb{R}^n$, $Ax = a \iff Bx = b$.

Nos interesan los sistemas equivalentes porque muchas veces resolver el sistema original es muy costoso computacionalmente. Pero quizás podemos encontrar otro sistema equivalente y más fácil de resolver.

Sistemas fáciles

A continuación vemos algunos sistemas de ecuaciones que son fáciles de resolver por la estructura de la matriz asociada al sistema.

Matriz diagonal

Supongamos que $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es la matriz **diagonal** asociada al sistema de ecuaciones y queremos encontrar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Dx = b$ para algún $b \in \mathbb{R}^n$. Como D es diagonal, cada ecuación tiene una única incógnita.

$$\begin{cases} d_{11}x_1 &= b_1 \\ &\vdots \\ d_{nn}x_n &= b_n \end{cases}$$

Caso $d_{ii} \neq 0$ para todo $i = 1 \dots n$

Si $d_{ii} \neq 0$ para todo $i = 1 \dots n$, entonces **existe solución y es única**. Podemos despejar unívocamente cada x_i de la siguiente manera:

$x_i = b_i/d_{ii}$ para todo $i = 1 \dots n$.

Obtenemos la solución en $O(n)$ operaciones elementales.

Caso existe algún $d_{ii} = 0$

Si existe algún $d_{ii} = 0$ el sistema puede o no tener solución. Esto depende del valor de b_i .

- Si $d_{ii} = 0$ y $b_i = 0$ entonces **hay infinitas soluciones** ya que podemos elegir cualquier valor para x_i tal que $d_{ii}x_i = b_i$ pues $0 * x_i = 0$ se cumple para cualquier x_i .
- Si $d_{ii} = 0$ y $b_i \neq 0$ entonces **no hay solución**.

Matriz triangular superior (backwards substitution)

Supongamos que $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es la matriz **triangular superior** asociada al sistema de ecuaciones y queremos encontrar $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ux = b$ para algún $b \in \mathbb{R}^n$.

Caso $u_{ii} \neq 0$ para todo $i = 1 \dots n$

Como U es una matriz triangular, si $u_{ii} \neq 0$ para todo $i = 1 \dots n$ podemos despejar cada coordenada de x empezando desde la última hasta la primera, utilizando los resultados previos en cada paso. En este caso **siempre existe solución y es única**. Esto se conoce como **backwards substitution** (sustitución hacia atrás).

Para calcular x_n podemos despejar de forma directa:

$$x_n = b_n/u_{nn}$$

Yendo hacia atrás, si miramos la ecuación $n - 1$ tenemos:

$$u_{n-1n-1}x_{n-1} + u_{n-1n}x_n = b_{n-1}$$

Dado que ya calculamos x_n en el primer paso, podemos despejar x_{n-1} de la siguiente manera:

$$x_{n-1} = (b_{n-1} - u_{n-1n}x_n)/u_{n-1n-1}$$

El caso general para x_i utiliza todos los valores ya calculados previamente para x_{i+1}, \dots, x_n .

$$x_i = (b_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij}x_j)/u_{ii}$$

Finalmente obtenemos x_1 con la misma estrategia, utilizando todas las coordenadas ya calculados de x desde 2 hasta n :

$$x_1 = (b_1 - \sum_{j=2}^n u_{1j}x_j)/u_{11}$$

Recordemos que todas estas operaciones están bien definidas ya que $u_{ii} \neq 0$ para todo $i = 1 \dots n$. Así obtenemos $x \in \mathbb{R}^n$ solución al sistema $Ux = b$ en $O(n^2)$ operaciones elementales.

Caso existe algún $u_{ii} = 0$

En este caso **puede o no haber solución**. Supongamos que existe algún $i \in [1, n]$ tal que $u_{ii} = 0$. En el paso i -ésimo del backwards substitution tenemos que despejar x_i . No podemos dividir por $u_{ii} = 0$ por lo tanto nos queda:

$$0 = x_i u_{ii} = b_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij}x_j$$

Solo hay solución si se cumple:

$$b_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij}x_j = 0$$

Y en tal caso hay **infinitas** soluciones ya que podemos elegir cualquier valor para x_i . Caso contrario el sistema no tiene solución.

Matriz triangular inferior (forward substitution)

Si en vez de U matriz triangular superior tuviésemos una matriz L **triangular inferior**, se puede aplicar la misma estrategia (con las mismas consideraciones sobre l_{ii}) realizando un **forward substitution** (sustitución hacia adelante). Consiste en primero despejar x_1 e ir avanzando hasta llegar a x_n , utilizando las coordenadas previamente calculadas en cada paso.

Sistemas generales

En el caso general, si la matriz asociada al sistema no es uno de los casos fáciles, nos gustaría tener un procedimiento que permita encontrar otro sistema equivalente que sí sea fácil de resolver.

Eliminación Gaussiana

Para esto podemos aplicar el método de **Eliminación Gaussiana** que consiste en sumar/restar ecuaciones (filas), multiplicarlas por un escalar y permutarlas. El objetivo es triangular la matriz del sistema y luego obtener una solución (si existe) con backwards substitution.

Este procedimiento también afecta al término independiente, ya que las transformaciones que realizamos para triangular la matriz tiene que generar un nuevo sistema equivalente al original.

Sean $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ y $b \in \mathbb{R}^n$. Extendemos la matriz A agregando b como la última columna. Llamamos A^k con $k = 0 \dots n-1$ a la matriz extendida en el paso k de la Eliminación Gaussiana.

$$A^0 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times (n+1)}$$

En el primer paso utilizamos a_{11}^0 como pivote para colocar ceros en la primer columna debajo de la diagonal principal.

$$A^0 = \begin{bmatrix} a_{11}^0 & a_{12}^0 & \dots & a_{1n}^0 & b_1^0 \\ a_{21}^0 & a_{22}^0 & \dots & a_{2n}^0 & b_2^0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{i1}^0 & a_{i2}^0 & \dots & a_{in}^0 & b_i^0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^0 & a_{n2}^0 & \dots & a_{nn}^0 & b_n^0 \end{bmatrix} \xrightarrow{\begin{matrix} F_2 - (a_{21}^0/a_{11}^0)F_1 \\ \vdots \\ F_i - (a_{i1}^0/a_{11}^0)F_1 \\ \vdots \\ F_n - (a_{n1}^0/a_{11}^0)F_1 \end{matrix}} \begin{bmatrix} a_{11}^1 & a_{12}^1 & \dots & a_{1n}^1 & b_1^1 \\ 0 & a_{22}^1 & \dots & a_{2n}^1 & b_2^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{i2}^1 & \dots & a_{in}^1 & b_i^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^1 & \dots & a_{nn}^1 & b_n^1 \end{bmatrix} = A^1$$

En el paso i -ésimo ya “triangulamos” (pusimos ceros debajo de la diagonal) las columnas 1 a $i-1$. Ahora repetimos el mismo procedimiento para la columna i , utilizando como pivote a_{ii}^{i-1} . Notemos que en cada paso i usamos la matriz A^{i-1} del paso anterior.

$$A^{i-1} = \begin{bmatrix} a_{11}^{i-1} & a_{12}^{i-1} & \dots & a_{1i}^{i-1} & \dots & a_{1n}^{i-1} & b_1^{i-1} \\ 0 & a_{22}^{i-1} & \dots & a_{2i}^{i-1} & \dots & a_{2n}^{i-1} & b_2^{i-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{ii}^{i-1} & \dots & a_{in}^{i-1} & b_i^{i-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{ni}^{i-1} & \dots & a_{nn}^{i-1} & b_n^{i-1} \end{bmatrix} \xrightarrow{\begin{matrix} F_{i+1} - (a_{i+1i}^{i-1}/a_{ii}^{i-1})F_i \\ \vdots \\ F_n - (a_{ni}^{i-1}/a_{ii}^{i-1})F_i \end{matrix}} \begin{bmatrix} a_{11}^i & a_{12}^i & \dots & a_{1i}^i & a_{1i+1}^i & \dots & a_{1n}^i & b_1^i \\ 0 & a_{22}^i & \dots & a_{2i}^i & a_{2i+1}^i & \dots & a_{2n}^i & b_2^i \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{ii}^i & a_{ii+1}^i & \dots & a_{in}^i & b_i^i \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{i+1i+1}^i & \dots & a_{i+1n}^i & b_{i+1}^i \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{ni+1}^i & \dots & a_{nn}^i & b_n^i \end{bmatrix} = A^i$$

Al concluir los $n-1$ pasos, obtenemos la matriz A^{n-1} que contiene un sistema equivalente al original y además la matriz del sistema es una matriz triangular superior.

$$A^{n-1} = \begin{bmatrix} a_{11}^{n-1} & a_{12}^{n-1} & \dots & a_{1i}^{n-1} & \dots & a_{1n}^{n-1} & b_1^{n-1} \\ 0 & a_{22}^{n-1} & \dots & a_{2i}^{n-1} & \dots & a_{2n}^{n-1} & b_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{ii}^{n-1} & \dots & a_{in}^{n-1} & b_i^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & a_{nn}^{n-1} & b_n^{n-1} \end{bmatrix}$$

Condición necesaria

La Eliminación Gaussiana requiere que $a_{ii}^{i-1} \neq 0$ para todo $i = 1 \dots n - 1$. Notar que **no** es suficiente que A^0 (la matriz original) tenga la diagonal sin ceros, esta condición pide que en cada paso i de la Eliminación Gaussiana, el pivote $a_{ii}^{i-1} \neq 0$. Puede suceder que la matriz original no tenga ceros en la diagonal pero que aparezcan luego de algunos pasos.

Si en el paso i -ésimo sucede que $a_{ii}^{i-1} = 0$ quizás podemos continuar con la Eliminación Gaussiana.

- Si la columna i ya tiene todo ceros debajo de la diagonal, es decir $a_{ji}^{i-1} = 0$ para todo $j = i + 1 \dots n$, entonces no hace falta operar con las filas y podemos avanzar al siguiente paso.
- Caso contrario, si existe algún $a_{ji}^{i-1} \neq 0$ con $j > i$ podemos permutar la fila i con la j y continuar con la Eliminación Gaussiana.

Pivoteo

Las estrategias de pivoteo no solo permiten realizar la Eliminación Gaussiana cuando el pivote es nulo, si no que también se puede utilizar para minimizar los errores numéricos al trabajar con aritmética finita. Notemos que en cada paso estamos dividiendo por a_{ii}^{i-1} . Para minimizar los errores numéricos conviene siempre dividir por el mayor número posible. En cada paso de la Eliminación Gaussiana podemos intercambiar filas y/o columnas de tal forma que $|a_{ii}^{i-1}|$ sea lo más grande posible.

- Pivoteo parcial (por filas): En el paso i -ésimo elegimos como pivote el mayor $|a_{ji}^{i-1}|$ con $j \in [i, n]$. Tenemos que permutamos la fila j con la i .
- Pivoteo completo (por filas y columnas): En el paso i -ésimo elegimos como pivote el mayor $|a_{jk}^{i-1}|$ con $j, k \in [i, n]$. Es decir miramos ahora toda la submatriz aún no triangulada para elegir el pivote. Luego tenemos que realizar las permutaciones necesarias para colocar el elemento a_{jk}^{i-1} en la posición i, i .

Complejidad

El método de Eliminación Gaussiana tiene una complejidad de $O(n^3)$ operaciones elementales. Dado que triangulamos la matriz del sistema junto al término independiente, si ahora queremos reutilizar la misma matriz pero con otro término independiente necesitamos volver a pagar el mismo costo cúbico.

Cuando tenemos un sistema que vamos a necesitar resolverlo muchas veces para distintos términos independientes, es más eficiente encontrar una descomposición de la matriz, como por ejemplo la descomposición LU o QR.

Factorización LU

Motivación

Supongamos que necesitamos resolver el sistema $Ax = b$ varias veces, es decir, para distintos términos independientes b . Usando Eliminación Gaussiana nos cuesta $O(n^3)$ **cada vez**, ya que al triangular la matriz del sistema también modificamos el término independiente. Si cambiamos b , hay que volver a triangular, por más que sea la misma matriz A .

Nos gustaría de alguna forma preservar la secuencia de operaciones que afectan al término independiente b durante la Eliminación Gaussiana para poder reaplicarlas sobre otro término independiente nuevo, y así reutilizar el sistema previamente triangulado.

Definición

Sean $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matriz triangular inferior y $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matriz triangular superior tal que $A = LU$.

$$Ax = b \iff LUx = b$$

Con la factorización LU podemos resolver el sistema en 2 etapas:

$$Ly = bUx = y$$

Como L y U son triangulares (inferior/superior), resolver cada uno de esos sistemas solo cuesta $O(n^2)$ usando backwards/forward substitution.

Procedimiento

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matriz del sistema. Llamamos A^k con $k = 0 \dots n-1$ a la matriz resultante después del paso k -ésimo de la Eliminación Gaussiana. Asumimos que $a_{ii}^{i-1} \neq 0$ para todo $i = 1 \dots n-1$.

En cada paso de la Eliminación Gaussiana colocamos ceros debajo de la diagonal en una columna en particular. Busquemos representar un paso de la Eliminación Gaussiana como una multiplicación de matrices.

Sea $M^1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ la matriz que codifica el paso 1 de la Eliminación Gaussiana. Esta matriz tiene unos en la diagonal y debajo de ella en la columna 1 tiene los multiplicadores necesarios tal que $M^1 A^0 = A^1$.

$$M^1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -m_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -m_{31} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -m_{n1} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

$$M^1 A^0 = \begin{bmatrix} a_{11}^0 & \dots & a_{1n}^0 \\ a_{21}^0 - m_{21}a_{11}^0 & \dots & a_{2n}^0 - m_{21}a_{1n}^0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^0 - m_{n1}a_{11}^0 & \dots & a_{nn}^0 - m_{n1}a_{1n}^0 \end{bmatrix} = A^1$$

Notemos que $\text{fila}_i(A^1) = \text{fila}_i(A^0) - m_{i1}\text{fila}_1(A^0)$ para todo $i = 2 \dots n$. Basta tomar $m_{i1} = a_{i1}^0/a_{11}^0$ para colocar ceros debajo de la diagonal en la columna 1 de A^1 .

$$A^1 = \begin{bmatrix} a_{11}^0 & \dots & a_{1n}^0 \\ 0 & \dots & a_{2n}^0 - m_{21}a_{1n}^0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & a_{nn}^0 - m_{n1}a_{1n}^0 \end{bmatrix}$$

En el caso general del paso i -ésimo de la Eliminación Gaussiana tenemos M^i tal que $M^i A^{i-1} = A^i$.

$$M^i = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \underbrace{-m_{i+1i}}_{\text{columna } i} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \underbrace{-m_{ni}}_{\text{columna } i} & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

Donde $m_{ji} = a_{ji}^{i-1}/a_{ii}^{i-1}$ con $i = 1 \dots n-1$ (la columna donde estamos poniendo los ceros) y $j = i+1 \dots n$.

Todo el método de la Eliminación Gaussiana se codifica como el siguiente producto matricial entre la matriz original A y todas las M^i , dando como resultado $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ triangular superior.

$$M^{n-1}M^{n-2}\dots M^1A = U$$

Propiedades de M^i

La matriz M^i la podemos representar de la siguiente forma.

$$M^i = I - m_i e_i^t$$

Donde el vector $m_i \in \mathbb{R}^n$ contiene los multiplicadores del paso i -ésimo de la Eliminación Gaussiana y e_i es el i -ésimo vector canónico.

$$\begin{aligned} m_i &= [0 \quad \dots \quad 0 \quad 0 \quad m_{i+1i} \quad \dots \quad m_{ni}] \\ e_i &= [0 \quad \dots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \dots \quad 0] \end{aligned}$$

M^i es triangular inferior por construcción. Su determinante es 1 ya que es el producto de su diagonal, que son todos unos. Luego M^i es invertible. ¿Quién es su inversa?

$$M^i(M^i)^{-1} = (I - m_i e_i^t)(I + m_i e_i^t) = I + m_i e_i^t - m_i e_i^t - m_i e_i^t m_i e_i^t = I - m_i \underbrace{e_i^t m_i}_{=0} e_i^t = I$$

Entonces $(M^i)^{-1} = I + m_i e_i^t$.

¿Quién es L ?

$$M^{n-1}M^{n-2}\dots M^1A = UA = (M^1)^{-1}(M^2)^{-1}\dots(M^{n-1})^{-1}UA = (I + m_1 e_1^t)(I + m_2 e_2^t)\dots(I + m_{n-1} e_{n-1}^t)U$$

Observando que $m_i e_i^t m_j e_j^t = 0$ si $j > i$ obtenemos:

$$A = (I + m_1 e_1^t + m_2 e_2^t + \dots + m_{n-1} e_{n-1}^t)U$$

Definimos entonces $L = I + m_1 e_1^t + m_2 e_2^t + \dots + m_{n-1} e_{n-1}^t$ matriz triangular inferior con unos en la diagonal y todos los multiplicadores usados durante la triangulación de A . Así obtenemos la factorización LU de A .

$$A = LU$$

Complejidad

Obtener la factorización LU cuesta $O(n^3)$ operaciones elementales. En esencia es la misma complejidad que la Eliminación Gaussiana.

Propiedades

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

- Si A es invertible y tiene factorización LU , entonces es única.
- Si todas las submatrices principales de A son invertibles, entonces tiene factorización LU .
- Si A es estrictamente diagonal dominante, entonces tiene factorización LU .
- No toda matriz tiene factorización LU .

Factorización PLU

Si existe algún $a_{ii}^{i-1} = 0$ la Eliminación Gaussiana puede continuar permutando filas. Dado que queremos encontrar una factorización que codifique los pasos de la Eliminación Gaussiana para poder resolver el mismo sistema con otros términos independientes de forma más eficiente que repitiendo toda la Eliminación Gaussiana otra vez, necesitamos guardar ahora las permutaciones realizadas.

Partiendo de una matriz de permutación $P = I$ que no permuta ninguna fila, buscamos la factorización PLU tal que:

$$PA = LU$$

En cada paso, si necesitamos permutar alguna fila actualizamos la matriz P con la permutación necesaria. Luego resolver un sistema $Ax = b$ es similar al caso sin permutación:

$$Ax = b \iff PLUx = b \iff LUx = P^{-1}b$$

Notemos que $P^{-1}b$ aplica las permutaciones realizadas durante la Eliminación Gaussiana al término independiente b para que se correspondan las coordenadas de b con las ecuaciones permutadas.

Observación: $P^{-1} = P$ por ser matriz de permutación.

Normas

SDP (simétrica definida positiva)

Definición

Una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es **simétrica definida positiva** (SDP) si se cumplen 2 condiciones:

1. A es simétrica.
 $A = A^t$
2. A es definida positiva.
 $x^t A x > 0$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$

Propiedades

Las matrices SDP tienen varias propiedades muy convenientes.

- A es inversible.
Si A no fuese inversible entonces existe $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$ tal que $Ax = 0$. Luego $x^t Ax = x^t 0 = 0 \not> 0$. Absurdo pues A es SDP.
- $a_{ii} > 0$ para todo $i = 1 \dots n$.
Como A es SDP, en particular $e_i^t A e_i = a_{ii} > 0$ para todo $i = 1 \dots n$.
- Toda submatriz principal también es SDP.
Sea A^k la submatriz de orden $k = 1 \dots n$. Es fácil ver que A^k es simétrica ya que es un “recorte” de la matriz original A que es simétrica. Supongamos que A^k no es definida positiva. Entonces existe $x \in \mathbb{R}^k$, $x \neq 0$ tal que $x^t A^k x \leq 0$. Sea $\bar{x} = (x, 0) \in \mathbb{R}^n$ la extensión de x a \mathbb{R}^n . Notemos que $\bar{x} \neq 0$, entonces $\bar{x}^t A \bar{x} > 0$ porque A es definida positiva. Si planteamos el producto matricial por bloques vemos que $\bar{x}^t A \bar{x} = x^t A^k x > 0$. Llegamos a una contradicción, luego A^k también es definida positiva.
- A es SDP sii $B^t A B$ es SDP con B invertible.
La simetría se ve fácil verificando que $B^t A B = (B^t A B)^t$. Para ver que es definida positiva planteamos

$x^t B^t A B x$ y usando que B es inversible hacemos un cambio de variable $Bx = y$. Luego se verifica que $y^t A y > 0$ pues A es SDP.

- La submatriz conformada por las filas y columnas 2 a n después del primer paso de la Eliminación Gaussiana es SDP.
Usando la propiedad anterior vemos que $M_1 A M_1^t$ es SDP y necesariamente la submatriz mencionada es también SDP.
- Se puede realizar el método de Eliminación Gaussiana sin necesidad de permutar filas.
Aplicando la propiedad anterior recursivamente podemos afirmar esta propiedad.
- Existe factorización LU .
Corolario de las propiedades anteriores.

Factorización Cholesky

La Factorización de Cholesky es otra manera de descomponer una matriz para poder resolver sistemas de ecuaciones lineales de manera fácil.

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ una matriz SDP, entonces existe factorización $A = LU$. Como A es simétrica y L inversible por ser triangular inferior con unos en la diagonal:

$$A = A^t \iff LU = (LU)^t \iff LU = U^t L^t \Rightarrow U(L^t)^{-1} = L^{-1} U^t$$

$U(L^t)^{-1}$ es triangular superior por ser producto de triangulares superiores. $L^{-1} U^t$ es triangular inferior por ser producto de triangulares inferiores.

$$U(L^t)^{-1} = L^{-1} U^t = D \Rightarrow U = D L^t$$

Donde D es una matriz diagonal. Volviendo a la factorización LU de A tenemos:

$$A = LU = L D L^t$$

A es SDP y además L^t es inversible. Entonces existe $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$ tal que $L^t x = e_i$ para todo $i = 1 \dots n$.

$$0 < x^t A x = x^t L D L^t x = (L^t x)^t D (L^t x) = e_i^t D e_i = d_{ii}$$

Como todos los elementos de la diagonal D son positivos, podemos descomponer D como el producto de dos matrices diagonales (que son iguales) donde tomamos la raíz cuadrada a toda la diagonal.

$$D = \sqrt{D} \sqrt{D}$$

Donde $(\sqrt{D})_{ii} = \sqrt{d_{ii}}$ para todo $i = 1 \dots n$.

Finalmente encontramos la factorización de Cholesky de A .

$$A = L \sqrt{D} \sqrt{D} L^t = L \sqrt{D} \sqrt{D}^t L^t = (L \sqrt{D})(L \sqrt{D})^t = \tilde{L} \tilde{L}^t$$

Donde $\tilde{L} = L \sqrt{D}$.

Unicidad

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. A es SDP sii tiene factorización de Cholesky: $A = \tilde{L}\tilde{L}^t$. Si además fijamos el signo de la diagonal de \tilde{L} , esta factorización es única.

Se puede probar por el absurdo suponiendo que existen 2 factorizaciones distintas. Finalmente se llega a una relación entre ambas factorizaciones donde quedan igualadas a I . De ahí se concluye que necesariamente comparten el mismo signo en la diagonal.

Algoritmo

Si bien toda matriz SDP tiene factorización LU , y desde ahí podemos obtener la factorización de Cholesky, también existe un algoritmo para encontrar la factorización de Cholesky de forma directa.

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ y $A = \tilde{L}\tilde{L}^t$ su factorización de Cholesky. En líneas generales el algoritmo consiste en plantear el producto matricial $\tilde{L}\tilde{L}^t$ e igualar cada elemento con los de A . Luego vamos despejando los elementos de \tilde{L} uno por uno, utilizando los valores previamente despejados (similar al backwards substitution).

Complejidad

En general obtener la factorización de Cholesky tiene un costo de $O(n^3)$ operaciones elementales. No obstante, posee una mejor constante respecto a la factorización LU .

Cholesky es $O(n^3/3)$ mientras que LU es $O(2n^3/3)$.

QR

Matrices ortogonales

Una matriz $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es ortogonal sii $Q^{-1} = Q^t$.

Equivalentemente Q es ortogonal si:

- Las columnas de Q forman un conjunto ortonormal (todas las columnas son ortogonales entre sí y tienen norma 2 igual a 1). Sean v_1, \dots, v_n las columnas de Q .

$$Q \text{ ortogonal} \iff \begin{cases} v_i^t v_j = 0 & i \neq j \\ v_i^t v_i = \|v_i\|_2^2 = 1 & \text{caso contrario} \end{cases}$$

- Las filas de Q forman un conjunto ortonormal.
- Q vista como una transformación lineal es una rotación o reflexión que preserva la norma 2.

$$\|Qx\|_2 = \|x\|_2 \iff \|Qx\|_2^2 = \|x\|_2^2$$

$$\|Qx\|_2^2 = (Qx)^t(Qx) = x^t \underbrace{Q^t Q}_I x = x^t x = \|x\|_2^2$$

Propiedades

- $\|Q\|_2 = 1$
- $\kappa_2(Q) = 1$ (las matrices ortogonales son estables numéricamente)
- $\det(Q) = \pm 1$
- Q y P ortogonales $\Rightarrow QP$ es ortogonal

Factorización QR

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonal y $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ triangular superior tal que $A = QR$.

La factorización QR es otra forma de descomponer una matriz para encontrar un sistema equivalente y fácil de resolver. Además, esta factorización tiene otras ventajas asociadas al hecho de que Q es ortogonal y tiene un número de condición igual a 1.

Dado $b \in \mathbb{R}^n$ buscamos todos los $x \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ax = b$.

$$Ax = b \iff QRx = b \iff Rx = Q^t b$$

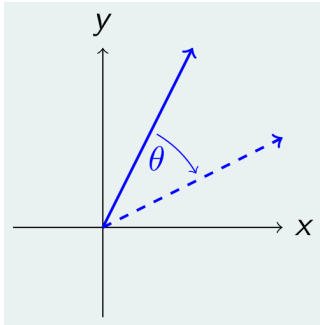
Podemos encontrar x en $O(n^2)$ operaciones elementales con backwards substitution ya que R es triangular superior.

Veamos ahora cómo podemos obtener la factorización QR . Existen principalmente 2 métodos.

Método Givens (rotaciones)

El método de Givens consiste en realizar una serie de rotaciones en un subespacio de dimensión 2 para ir colocando ceros estratégicamente debajo de la diagonal principal.

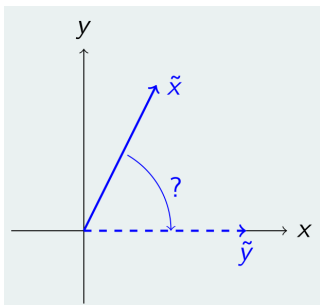
Rotaciones en el plano



Sea $W \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ una matriz ortogonal que rota cualquier vector una cantidad θ de grados en sentido horario.

$$W = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

La matriz W codifica una rotación para un cierto ángulo θ el cual está fijo. Es decir, W rota **cualquier** vector siempre por el mismo ángulo. Sin embargo, no nos interesa definir explícitamente el ángulo θ . En cambio, queremos definir W a partir de un vector en particular y hacia dónde lo queremos rotar, con el objetivo final de triangular una matriz de 2×2 .



Dado $\tilde{x} \in \mathbb{R}^2$, queremos construir la matriz de rotación $W \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ para que rote al vector \tilde{x} lo necesario para dejarlo “apoyado sobre el eje x”. Es decir, $W\tilde{x} = \tilde{y}$ con $\tilde{y} \in \mathbb{R}^2$, $\tilde{y} = (||\tilde{x}||_2, 0)$.

En vez de buscar el ángulo y luego calcular los cosenos y senos, usamos las equivalencias trigonométricas (coseno = adyacente/hipotenusa, seno = opuesto/hipotenusa) para despejar los cosenos y senos sin necesidad de conocer el ángulo de rotación. De esta forma se puede obtener la matriz W para cualquier par de vectores \tilde{x} e \tilde{y} que cumplan con las condiciones antes mencionadas.

$$W = \begin{bmatrix} \tilde{x}_1/||\tilde{x}||_2 & \tilde{x}_2/||\tilde{x}||_2 \\ -\tilde{x}_2/||\tilde{x}||_2 & \tilde{x}_1/||\tilde{x}||_2 \end{bmatrix}$$

Caso matriz 2×2

Si tenemos una matriz cualquiera $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, podemos triangularla de la siguiente manera. Primero definimos los vectores \tilde{x} e \tilde{y} .

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad \tilde{x} = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{bmatrix} \quad \tilde{y} = \begin{bmatrix} ||\tilde{x}||_2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Por lo expuesto anteriormente, sabemos que existe $W \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ tal que $W\tilde{x} = \tilde{y}$. Luego:

$$WA = \begin{bmatrix} ||\tilde{x}||_2 & * \\ 0 & * \end{bmatrix} = R$$

Como W es ortogonal, su inversa es W^t .

$$WA = R \iff W^tWA = W^tR \Rightarrow A = QR$$

Donde $Q = W^t$ y R es una matriz triangular superior.

Caso matriz $n \times n$

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Para el caso general de una matriz de $n \times n$ vamos a necesitar realizar muchas rotaciones para triangular la matriz. Cada rotación coloca un único cero debajo de la diagonal principal.

Para el primer paso definimos $\tilde{x} = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{bmatrix}$, $\tilde{y} = \begin{bmatrix} ||\tilde{x}||_2 \\ 0 \end{bmatrix}$.

Al igual que el caso de 2×2 sabemos que existe $W \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ ortogonal tal que $W\tilde{x} = \tilde{y}$.

$$W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} \\ w_{21} & w_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{x}_1/||\tilde{x}||_2 & \tilde{x}_2/||\tilde{x}||_2 \\ -\tilde{x}_2/||\tilde{x}||_2 & \tilde{x}_1/||\tilde{x}||_2 \end{bmatrix}$$

Ahora embebemos W en una matriz identidad de $n \times n$ la cual llamamos $W_{12} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (los subíndices hacen referencia a las 2 coordenadas que definen el plano sobre el cual vamos a realizar la rotación).

$$W_{12} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & 0 & \dots & 0 \\ w_{21} & w_{22} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

El primer paso de la factorización QR utilizando el método de Givens resulta:

$$W_{12}A = \begin{bmatrix} * & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ a_{31} & a_{32} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Para el segundo paso redefinimos $\tilde{x} = \begin{bmatrix} a_{11}^1 \\ a_{31}^1 \end{bmatrix}$, $\tilde{y} = \begin{bmatrix} \|\tilde{x}\|_2 \\ 0 \end{bmatrix}$. Notemos que siempre usamos los elementos resultantes del paso anterior, al igual que la factorización LU . Nuevamente sabemos que existe $W \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ ortogonal tal que $W\tilde{x} = \tilde{y}$, y la embebemos junto a la identidad en una matriz de $n \times n$.

$$W_{13} = \begin{bmatrix} w_{11} & 0 & w_{12} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ w_{21} & 0 & w_{22} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

Multiplicamos a izquierda el resultado del paso anterior:

$$W_{13}W_{12}A = \begin{bmatrix} * & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ a_{41} & a_{42} & \dots & a_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Como vamos colocando un cero en cada paso, necesitamos barrer todas las posiciones debajo de la diagonal principal. El paso genérico se define para todo $i = 1 \dots n-1$, para todo $j = i+1 \dots n$. En el paso ij colocamos un cero en la posición ji .

$$\tilde{x} = \begin{bmatrix} a_{ii}^{i-1} \\ a_{ji}^{i-1} \end{bmatrix} \quad \tilde{y} = \begin{bmatrix} \|\tilde{x}\|_2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad W_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & w_{ii} & \dots & w_{ij} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & w_{ji} & \dots & w_{jj} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

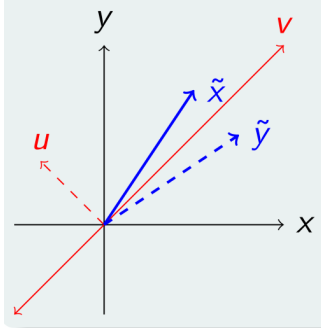
La factorización QR completa se obtiene multiplicando A por todas las matrices de rotación W_{ij} (que como son ortogonales su inversa es igual a su traspuesta):

$$W_{n-1n}W_{n-2n}W_{n-2n-1} \dots W_{1n} \dots W_{13}W_{12}A = R \iff A = \underbrace{W_{12}^t W_{13}^t \dots W_{1n}^t \dots W_{n-2n-1}^t W_{n-2n}^t W_{n-1n}^t}_Q R = QR$$

Método Householder (reflexiones)

El método de Householder consiste en aplicar sucesivas reflexiones para colocar ceros debajo de la diagonal principal. Una reflexión es una transformación lineal que refleja todo vector respecto a un hiper-plano. Si bien una reflexión concreta se puede modelar como una rotación, donde el método de Givens construye una matriz de rotación que tiene configurada un ángulo de rotación fijo, Householder solo define el plano de reflexión, y por lo tanto cada vector será rotado un ángulo distinto, el que sea necesario para reflejar el vector respecto al plano. En una matriz de Householder lo que queda fijo es justamente el plano de reflexión.

¿Qué es una reflexión?



Una reflexión se define a partir de un hiper-plano. En el caso de \mathbb{R}^2 sería una recta. Sea $H \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ una matriz ortogonal que refleja respecto a la dirección v .

- $Hv = v$ pues la propia dirección de reflexión se mantiene constante al aplicar la transformación H .
- $Hu = -u$ pues la dirección ortogonal a la dirección de reflexión se invierte al aplicar la transformación H (se puede pensar como que se rota 180°).
- $H\tilde{x} = \tilde{y}$ para cualquier otro caso. El ángulo que se forma entre \tilde{x} y v es exactamente igual al que se forma entre \tilde{y} y v .

¿Cómo se construye la matriz H ?

Como u y v forman una base por ser vectores ortogonales, podemos escribir \tilde{x} y su reflexión \tilde{y} como combinación lineal de ellos.

$$\tilde{x} = \alpha v + \beta u \quad \tilde{y} = \alpha v - \beta u$$

Buscamos $H, W \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ tal que:

$$H\tilde{x} = \tilde{y} \iff H\tilde{x} = \alpha v - \beta u \iff H\tilde{x} = \underbrace{\alpha v + \beta u}_{I\tilde{x}} - \underbrace{2\beta u}_{W\tilde{x}} \iff H\tilde{x} = I\tilde{x} - W\tilde{x}$$

$$\text{Donde } W\tilde{x} \stackrel{\text{def } \tilde{x}}{=} W(\alpha v + \beta u) = \alpha Wv + \beta Wu = 2\beta u \iff \begin{cases} Wv = 0 \\ Wu = 2u \end{cases}$$

Asumiendo que $\|u\|_2 = 1$, definimos $P \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ como $P = uu^t$.

- P es simétrica: $P^t = P$
 $P^t = (uu^t)^t = (u^t)^t u^t = uu^t = P$
- $PP^t = P$
 $PP^t = PP = (uu^t)(uu^t) = u(u^t u)u^t = u \underbrace{\|u\|_2^2}_{=1} u^t = uu^t = P$

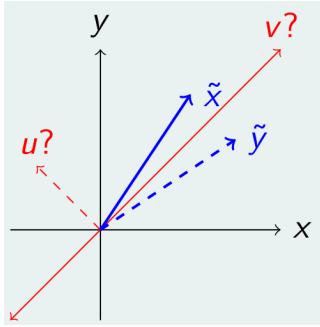
- $Pu = u$
 $Pu = (uu^t)u = u(u^tu) = u \underbrace{\|u\|_2^2}_{=1} = u$
- $Pv = 0$
 $Pv = (uu^t)v = u(u^tv) = 0$ pues $u \perp v \Rightarrow u^tv = 0$

Si definimos $W = 2P$ tenemos $H = I - 2P$. Veamos que $H\tilde{x} = \tilde{y}$.

$$H\tilde{x} = I\tilde{x} - 2P\tilde{x} = \alpha v + \beta u - 2P(\alpha v + \beta u) = \alpha v + \beta u - 2\alpha \underbrace{Pv}_{=0} - 2\beta \underbrace{Pu}_u = \alpha v - \beta u = \tilde{y}$$

Finalmente tenemos $H = I - 2uu^t$ con H simétrica y ortogonal. Este mismo procedimiento se extiende a dimensiones más grandes.

¿Cómo podemos obtener H a partir de \tilde{x} e \tilde{y} ?



Sean $\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\tilde{x} \neq \tilde{y}$, $\|\tilde{x}\|_2 = \|\tilde{y}\|_2$ (necesitamos que tengan la misma norma pues si no H no podría ser ortogonal ya que estaría deformando el espacio además de reflejarlo). Por lo expuesto anteriormente existe $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ transformación de Householder tal que $H\tilde{x} = \tilde{y}$.

De forma similar al método de Givens en donde no queríamos buscar explícitamente el ángulo θ porque sabíamos exactamente a dónde queríamos rotar \tilde{x} , en el método de Householder pasa algo parecido. Queremos simplemente definir H a partir de \tilde{x} e \tilde{y} (que luego vamos a elegir de forma conveniente para triangular la matriz).

$$v = \tilde{x} + \tilde{y} \quad u = \frac{\tilde{x} - \tilde{y}}{\|\tilde{x} - \tilde{y}\|_2} \quad H = I - 2uu^t = I - 2 \frac{(\tilde{x} - \tilde{y})(\tilde{x} - \tilde{y})^t}{\|\tilde{x} - \tilde{y}\|_2^2}$$

Ejemplo 2×2

Sea $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$. Definimos $\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{R}^2$ tal que $\tilde{x} \neq \tilde{y}$, $\|\tilde{x}\|_2 = \|\tilde{y}\|_2$.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad \tilde{x} = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{bmatrix} \quad \tilde{y} = \begin{bmatrix} \|\tilde{x}\|_2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Observación: si $a_{21} = 0$ entonces $\tilde{x} = \tilde{y}$, pero de ser así A ya estaría triangulada y no es necesario hacer ninguna transformación.

Sabemos que existe una transformación de Householder $H \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ tal que $H\tilde{x} = \tilde{y}$.

$$HA = \begin{bmatrix} \|\tilde{x}\|_2 & * \\ 0 & * \end{bmatrix} = R$$

Como H es ortogonal, su inversa es H^t .

$$HA = R \iff H^t HA = H^t R \Rightarrow A = QR$$

Donde $Q = H^t$ y R es una matriz triangular superior.

Caso general $n \times n$

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. El procedimiento consiste en aplicar distintas transformaciones de Householder de manera recursiva. Primero se aplica a toda la matriz original A para triangular la primer columna. Luego consideramos la submatriz formada desde la fila y columna 2 hasta la n y repetimos el proceso, triangulando la primer columna de esta submatriz que en realidad es la segunda columna de la matriz de $n \times n$.

Primer paso Sean $\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$$\tilde{x} = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix} \quad \tilde{y} = \begin{bmatrix} ||\tilde{x}||_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Existe una transformación de Householder $H_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tal que $H_1 \tilde{x} = \tilde{y}$.

$$H_1 = I - 2u_1 u_1^t \quad u_1 = \frac{\tilde{x} - \tilde{y}}{||\tilde{x} - \tilde{y}||_2}$$

Obtenemos A^1 (la matriz resultante luego del primer paso de la factorización) multiplicando a izquierda por H_1 .

$$H_1 A^0 = \begin{bmatrix} ||\tilde{x}||_2 & a_{12}^1 & \dots & a_{1n}^1 \\ 0 & a_{22}^1 & \dots & a_{2n}^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^1 & \dots & a_{nn}^1 \end{bmatrix} = A^1$$

Segundo paso Sean $\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{R}^{n-1}$ tal que:

$$\tilde{x} = \begin{bmatrix} a_{22}^1 \\ a_{32}^1 \\ \vdots \\ a_{n2}^1 \end{bmatrix} \quad \tilde{y} = \begin{bmatrix} ||\tilde{x}||_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Existe una transformación de Householder $\tilde{H} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ tal que $\tilde{H} \tilde{x} = \tilde{y}$.

$$\tilde{H} = I - 2u_2 u_2^t \quad u_2 = \frac{\tilde{x} - \tilde{y}}{||\tilde{x} - \tilde{y}||_2} \in \mathbb{R}^{n-1}$$

Embebemos \tilde{H} adentro de $H_2 \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{H} \end{bmatrix}$$

Obtenemos A^2 multiplicando a izquierda por H_2 .

$$H_2 A^1 = \begin{bmatrix} a_{11}^1 & a_{12}^1 & a_{13}^1 & \dots & a_{1n}^1 \\ 0 & \|\tilde{x}\|_2 & a_{23}^2 & \dots & a_{2n}^2 \\ 0 & 0 & a_{33}^2 & \dots & a_{3n}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^2 & \dots & a_{nn}^2 \end{bmatrix} = A^2$$

Paso i -ésimo En el paso i -ésimo trabajamos con una transformación de Householder de $\mathbb{R}^{(n-i+1) \times (n-i+1)}$ que triangula la columna i -ésima, que a su vez es la primer columna de la submatriz formada desde la fila y columna i hasta la n .

Sean $\tilde{x}, \tilde{y} \in \mathbb{R}^{n-i+1}$ tal que:

$$\tilde{x} = \begin{bmatrix} a_{ii}^{i-1} \\ a_{i+1i}^{i-1} \\ \vdots \\ a_{ni}^{i-1} \end{bmatrix} \quad \tilde{y} = \begin{bmatrix} \|\tilde{x}\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Existe una transformación de Householder $\tilde{H} \in \mathbb{R}^{(n-i+1) \times (n-i+1)}$ tal que $\tilde{H}\tilde{x} = \tilde{y}$.

$$\tilde{H} = I - 2u_i u_i^t \quad u_i = \frac{\tilde{x} - \tilde{y}}{\|\tilde{x} - \tilde{y}\|_2} \in \mathbb{R}^{n-i+1}$$

Embebemos \tilde{H} adentro de $H_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$H_i = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & \tilde{H} \end{bmatrix} \quad I \in \mathbb{R}^{(i-1) \times (i-1)}$$

Obtenemos A^i multiplicando a izquierda por H_i .

$$H_i A^{i-1} = \begin{bmatrix} a_{11}^{i-1} & a_{12}^{i-1} & \dots & a_{1i}^{i-1} & a_{1i+1}^{i-1} & \dots & a_{1n}^{i-1} \\ 0 & a_{22}^{i-1} & \dots & a_{2i}^{i-1} & a_{2i+1}^{i-1} & \dots & a_{2n}^{i-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \|\tilde{x}\|_2 & a_{ii+1}^i & \dots & a_{in}^i \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{i+1i+1}^i & \dots & a_{i+1n}^i \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{ni+1}^i & \dots & a_{nn}^i \end{bmatrix} = A^i$$

Último paso Luego de aplicar todas las $n-1$ transformaciones de Householder obtenemos la factorización QR . Recordemos que todas las H_i son ortogonales y entonces su inversa es su traspuesta, y además el producto de todas las H_i también es una matriz ortogonal.

$$H_{n-1} \dots H_1 A = R \iff A = \underbrace{H_1^t \dots H_{n-1}^t}_Q R = QR$$

Complejidad

El método de Givens tiene un costo de $O(4/3n^3)$.

El método de Householder tiene un costo de $O(2/3n^3)$.

Como el método de Givens coloca un solo cero en cada paso, si la matriz a triangular es rala (ya tiene muchos ceros), Givens puede ser más eficiente que Householder ya que se puede selectivamente solo realizar los pasos para colocar los ceros donde haga falta y evitar pasos redundantes.

Unicidad

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ inversible. La factorización $A = QR$ es única si pedimos que $r_{ii} > 0$ para todo $i = 1 \dots n$.

Autovalores

Definición

Sea $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. $\lambda \in \mathbb{C}$ es un autovalor de A si existe $v \in \mathbb{C}^n$, $v \neq 0$ tal que:

$$Av = \lambda v$$

Decimos que v es un autovector asociado al autovalor λ . Para encontrar los autovalores podemos desarrollar la definición de la siguiente manera:

$$Av = \lambda v \iff Av - \lambda v = 0 \iff (A - \lambda I)v = 0$$

Esto nos dice que $v \in Nu(A - \lambda I)$, y como $v \neq 0$ necesariamente vale que:

$$Nu(A - \lambda I) \neq \{0\} \iff A - \lambda I \text{ no inversible} \iff \det(A - \lambda I) = 0$$

Al desarrollar la fórmula del determinante obtenemos el **polinomio característico** de la matriz: $P(\lambda) = \det(A - \lambda I)$. Luego λ es autovalor de A si λ es raíz de $P(\lambda)$.

Ya sabemos encontrar los autovalores. ¿Cómo podemos obtener los autovectores? Para cada autovalor λ volvemos a la definición original y reemplazamos el autovalor en el sistema dado por $(A - \lambda I)v = 0$. Luego resolvemos ese sistema homogéneo para encontrar v .

Autoespacios y multiplicidad

Los autovectores son las direcciones que se preservan al aplicar la transformación lineal A . El autovalor asociado codifica cuánto se estira o contrae en la dirección del autovector. Por eso, si v es un autovector asociado a λ , entonces αv para cualquier $\alpha \in \mathbb{R}$ también es un autovector asociado a λ .

Definimos el **autoespacio** asociado al autovalor λ como el subespacio $S_\lambda = Nu(A - \lambda I)$. Todos los autovectores asociados a λ están en S_λ . La multiplicidad geométrica del autovalor λ está dada por la dimensión del autoespacio: $m_G(\lambda) = \dim(S_\lambda)$.

Por otro lado, el polinomio característico $P(\lambda)$ tiene n raíces contadas con multiplicidad. No obstante, pueden haber raíces complejas no reales y raíces múltiples. Si $\lambda \notin \mathbb{R}$ entonces no hay autoespacio en \mathbb{R}^n . Llamamos $m_A(\lambda)$ a la multiplicidad algebraica del autovalor λ .

La relación entre la multiplicidad algebraica y geométrica es la siguiente:

$$1 \leq m_G(\lambda) \leq m_A(\lambda)$$

Si sucede que $m_G(\lambda) = m_A(\lambda)$ para todos los autovalores, entonces los autovectores forman una base de \mathbb{R}^n .

Radio espectral

Se define el radio espectral de A como:

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \text{ es autovalor de } A\}$$

El radio espectral cuantifica la máxima deformación que realiza la transformación A en alguna dirección. Algunos casos de uso del radio espectral son:

- Si tenemos un esquema iterativo con una matriz de iteración T , el esquema converge para cualquier x_0 inicial si $\rho(T) < 1$.
- La norma matricial de orden 2 de una matriz A coincide con la raíz del radio espectral de $A^t A$: $\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^t A)}$.

Discos de Gershgorin

Los discos de Gershgorin nos permiten acotar los autovalores adentro de discos en el plano complejo.

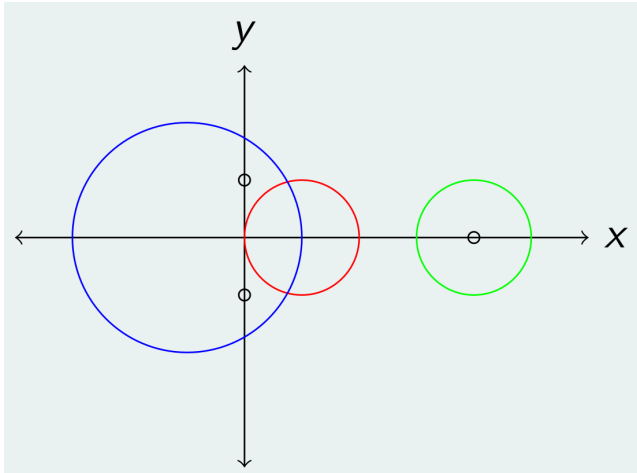
Sea $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ y $r_i = \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$ para $i = 1 \dots n$. Definimos el disco de Gershgorin como:

$$D_i = \{x \in \mathbb{C} : |x - a_{ii}| \leq r_i\} \text{ para } i = 1 \dots n$$

Luego, si λ es autovalor de A entonces $\lambda \in D_i$ para algún $i \in [1, n]$. Todos los autovalores están adentro de algún disco, pero puede pasar que haya discos en donde no hay ningún autovalor.

Si $M = D_{i_1} \cup D_{i_2} \cup \dots \cup D_{i_m}$ es disjunto respecto al resto de los discos entonces en M hay exactamente m autovalores de A contados con multiplicidad.

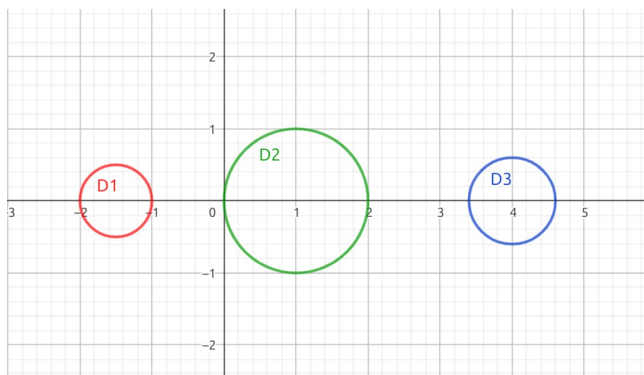
Ejemplos



Sean D_1 (azul), D_2 (rojo) y D_3 (verde) los discos de alguna matriz $A \in \mathbb{C}^{3 \times 3}$.

En $M_1 = D_1 \cup D_2$ tenemos 2 autovalores ya que $M_1 \overset{D}{\cup} D_3$.

En $M_2 = D_3$ tenemos 1 autovalor ya que $M_2 \overset{D}{\cup} (D_1 \cup D_2)$.



Si fuese el caso donde todos los D_i son disjuntos, entonces en cada disco habría un único autovalor, y por lo tanto la multiplicidad algebraica de cada autovalor sería 1, dando lugar a n autovalores distintos.

Matrices semejantes

$A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ son matrices semejantes si existe $P \in \mathbb{C}^{n \times n}$ matriz inversible tal que:

$$A = PBP^{-1}$$

Lo interesante es que si A y B son semejantes entonces **tienen los mismos autovalores**. La noción de semejanza viene a raíz de que la transformación que realiza A en la base canónica es la misma que realiza B en otra base definida por P . La transformación PBP^{-1} en esencia hace un cambio de base, aplica la transformación B y luego vuelve a la base canónica.

Cuando A es semejante a una diagonal decimos que A es diagonalizable:

$$A = PDP^{-1}$$

A es **diagonalizable sii sus autovectores forman una base**. Este resultado es importante ya que significa que la transformación lineal definida por A la podemos interpretar como deformaciones (estirar/contraer) realizadas sobre cada uno de los ejes canónicos. La matriz P se encarga de hacer el cambio de base hacia/desde la base canónica.

Verificar si A es diagonalizable puede ser muy costoso. Nos gustaría tener una forma más fácil de saber si A tiene una base de autovectores.

Propiedades

A efectos prácticos de la materia nos enfocamos en matrices con coeficientes reales. Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

- Si λ es autovalor de A con autovector asociado v , entonces λ^k es autovalor de A^k con el mismo autovector asociado v . Volviendo a la interpretación geométrica, aplicar k veces la transformación lineal va a estirar/contraer por λ^k a la dirección v que es preservada por A .
- Si A es una matriz ortogonal entonces sus autovalores son $\lambda = \pm 1$. Recordemos que las matrices ortogonales son transformaciones que solo rotan/reflejan sin deformar el espacio.
- Si λ es autovalor de A entonces también lo es de A^t . Esto se deduce a partir de que A y A^t tienen el mismo polinomio característico.
- Si todos los autovalores de A están en \mathbb{R} :
 - Todos los autovectores también están en \mathbb{R}^n , pues se obtienen resolviendo un sistema definido completamente en \mathbb{R} mediante operaciones cerradas en \mathbb{R} .

- Si además todos los autovalores son distintos entonces los autovectores son linealmente independientes. Luego forman una base de \mathbb{R}^n .
- Existen $Q, T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ con Q ortogonal y T triangular superior tal que A es ortogonalmente semejante a T . Es decir: $A = QTQ^t$.
- Si A es simétrica:
 - Todos sus autovalores están en \mathbb{R} .
 - Si $\lambda_1 \neq \lambda_2$ son autovalores de A entonces sus autovectores asociados v_1 y v_2 son ortogonales entre sí.
 - Existen $Q, D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ con Q ortogonal y D diagonal tal que $A = QDQ^t$. Las columnas de Q son los autovectores de A y D contiene todos los autovalores de A .
 - Los autovectores forman una base ortonormal.

Método de la potencia

Para poder obtener los autovalores y autovectores asociados podemos utilizar un método iterativo llamado método de la potencia.

Sean $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\lambda_1 \dots \lambda_n \in \mathbb{R}$ sus n autovalores y $v_1 \dots v_n \in \mathbb{R}^n$ los autovectores asociados que forman una base.

Sin pérdida de generalidad supongamos que ordenamos los autovalores tal que $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|$.

A partir de un vector arbitrario inicial $x_0 \in \mathbb{R}^n$ tal que $\|x_0\|_2 = 1$ definimos la sucesión $\{x_k\}$ como:

$$x_k = \frac{Ax_{k-1}}{\|Ax_{k-1}\|_2}$$

Dicha sucesión converge al autovector v_1 . Para obtener el autovalor realizamos la siguiente cuenta:

$$Av_1 = \lambda_1 v_1 \iff v_1^t Av_1 = \lambda_1 v_1^t v_1 \iff v_1^t Av_1 = \lambda_1 \underbrace{\|v_1\|_2^2}_{=1} \iff v_1^t Av_1 = \lambda_1$$

Dado que los autovectores forman una base, si consideramos a x_k como una combinación lineal de los autovectores, la idea del método es que en cada iteración se “acentúa” la dirección del autovector v_1 pues λ_1 es el autovalor más grande en módulo. Al normalizar x_k para la siguiente iteración, los coeficientes que acompañan a los autovectores $v_2 \dots v_n$ tienden a 0. Después de una cantidad lo suficientemente grande de iteraciones y gracias a la aritmética finita el único coeficiente que sobrevive es el que acompaña a v_1 .

Generalmente se configura un máximo de iteraciones y también se puede incluir una condición de corte temprano que consiste en ver si la distancia (medida con alguna norma) entre x_k y x_{k-1} es menor que algún umbral. En tal caso se considera x_k como suficientemente bueno y no es necesario realizar más iteraciones.

Hay que mencionar que existe una probabilidad no nula (pero muy baja) de que el x_0 inicial elegido de manera arbitraria justo tenga un coeficiente ≈ 0 acompañando al autovector v_1 si consideramos a x_0 como combinación lineal de los autovectores. En este caso el método puede no converger o necesitar una cantidad excesivamente grande de iteraciones para hacerlo. Una solución consiste simplemente en reintentar el método con un nuevo x_0 inicial.

Método de deflación

Utilizando el método de la potencia encontramos λ_1 y v_1 . ¿Cómo podemos encontrar todos los autovalores y autovectores? Como ya sabemos obtener el autovalor más grande en módulo, el método de deflación consiste

en obtener una nueva matriz donde el autovalor λ_1 pasó a ser el más chico y repetir así el método de la potencia sobre esta nueva matriz, hayando el nuevo autovalor más grande en módulo que será λ_2 .

Sean $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\lambda_1 \in \mathbb{R}$ autovalor con autovector asociado $v_1 \in \mathbb{R}^n$ tal que $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|$.

Sea $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matriz ortogonal tal que $Hv_1 = e_1$.

$$HAH^t = \begin{bmatrix} \lambda_1 & a^t \\ 0 & \tilde{A} \end{bmatrix}$$

Notemos que A y HAH^t tienen los mismos autovalores. Si planteamos el polinomio característico de HAH^t obtenemos:

$$\det(HAH^t - \lambda I) = (\lambda_1 - \lambda) * \det(\tilde{A} - \lambda I)$$

Entonces el resto de los autovalores de A : $\lambda_2 \dots \lambda_n$ son autovalores de \tilde{A} . Para encontrar el resto de los autovalores (o la cantidad que se necesite) simplemente repetimos el método de la potencia sobre esta nueva matriz \tilde{A} para encontrar λ_2 . Luego volvemos a aplicar la deflación y así sucesivamente.

SVD

Definición

Sean $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ y $r = \text{rango}(A)$. Existen $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ortogonal, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ortogonal y $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ pseudo-diagonal tales que:

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

La descomposición en valores singulares (SVD) utiliza 3 matrices muy específicas para descomponer A .

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_r & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} | & & | \\ u_1 & \dots & u_m \\ | & & | \end{bmatrix} \quad V = \begin{bmatrix} | & & | \\ v_1 & \dots & v_n \\ | & & | \end{bmatrix}$$

Realizamos el siguiente desarrollo para encontrar una relación entre las distintas matrices y los valores singulares $\sigma_1 \dots \sigma_r$.

$$\begin{aligned} A = U\Sigma V^t &\iff AV = U\Sigma \iff \begin{cases} Av_i = \sigma_i u_i & i = 1 \dots r \\ Av_i = 0 & i = r+1 \dots n \end{cases} \quad \begin{matrix} (1) \\ (2) \end{matrix} \\ A = U\Sigma V^t &\iff U^t A = \Sigma V^t \iff A^t U = V\Sigma^t \iff \begin{cases} A^t u_i = \sigma_i v_i & i = 1 \dots r \\ A^t u_i = 0 & i = r+1 \dots m \end{cases} \quad \begin{matrix} (3) \\ (4) \end{matrix} \end{aligned}$$

¿Quiénes son los v_i ?

$$Av_i = \sigma_i u_i \iff A^t Av_i = \sigma_i A^t u_i \xLeftrightarrow{(3)} A^t Av_i = \sigma_i \sigma_i v_i \iff A^t Av_i = \sigma_i^2 v_i \quad \text{para todo } i = 1 \dots r$$

$$Av_i = 0 \iff A^t Av_i = 0 \quad \text{para todo } i = r+1 \dots n$$

Deducimos entonces que los v_i son los autovectores de $A^t A$.

- $A^t A$ es una matriz simétrica entonces existe una base ortonormal de autovectores.
- $A^t A$ es semi definida positiva entonces sus autovalores son ≥ 0 pues $0 \leq v^t A^t A v = v^t \lambda v = \lambda \|v\|_2^2 \xrightarrow{v \neq 0} 0 \leq \lambda$.
- $\text{rango}(A^t A) = \text{rango}(A) = r$ entonces hay r autovalores no nulos y 0 es autovalor con multiplicidad $n - r$.

Sean $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_r > 0$ los autovalores no nulos de $A^t A$ con $v_1 \dots v_r$ sus autovectores asociados. Sean $v_{r+1} \dots v_n$ los autovectores asociados al autovalor nulo.

Definimos los valores singulares como $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i} > 0$ para todo $i = 1 \dots r$, donde λ_i son los autovalores de $A^t A$.

Los autovectores $v_1 \dots v_n$ forman un conjunto ortonormal y son los candidatos a ser las columnas de la matriz V .

¿Quiénes son los u_i ?

A partir de las definiciones previas y utilizando la ecuación (1) definimos:

$$Av_i = \sigma_i u_i \xLeftrightarrow{\sigma_i > 0} u_i = \frac{1}{\sigma_i} Av_i \quad \text{para todo } i = 1 \dots r$$

Como los u_i son las columnas de U matriz ortogonal, tenemos que verificar que $u_1 \dots u_r$ sea un conjunto ortonormal.

$$u_i^t u_j = \frac{1}{\sigma_i} (Av_i)^t \frac{1}{\sigma_j} Av_j = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} v_i^t A^t Av_j \overset{\substack{v_j \text{ autovector de } A^t A \\ v_i \perp v_j}}{=} \frac{\lambda_j}{\sigma_i \sigma_j} v_i^t v_j \overset{v_i \perp v_j}{=} 0$$

$$u_i^t u_i = \frac{1}{\sigma_i} (Av_i)^t \frac{1}{\sigma_i} Av_i = \frac{1}{\sigma_i \sigma_i} v_i^t A^t Av_i \overset{\substack{v_i \text{ autovector de } A^t A \\ \|v_i\|_2^2 = 1}}{=} \frac{\lambda_i}{\sigma_i \sigma_i} v_i^t v_i \overset{\lambda_i = \sigma_i^2}{=} \frac{\lambda_i}{\sigma_i \sigma_i} = 1$$

Los r vectores $u_1 \dots u_r$ pertenecen a $\text{Im}(A)$ que tiene $\dim(\text{Im}(A)) = r$. Como son un conjunto ortonormal entonces son una base ortonormal de $\text{Im}(A)$.

El resto de los $u_{r+1} \dots u_m$ tienen que pertenecer al $\text{Nu}(A^t)$ por la ecuación (4). $\text{Im}(A)$ está en suma directa con su ortogonal: $\text{Im}(A) \oplus \text{Im}(A)^\perp = \mathbb{R}^m$. Como $\text{Im}(A)^\perp = \text{Nu}(A^t)$, basta tomar $u_{r+1} \dots u_m$ como una base ortonormal de $\text{Nu}(A^t)$ y así el conjunto $u_1 \dots u_m$ forma una base ortonormal de todo \mathbb{R}^m y son los candidatos a ser las columnas de la matriz ortogonal U .

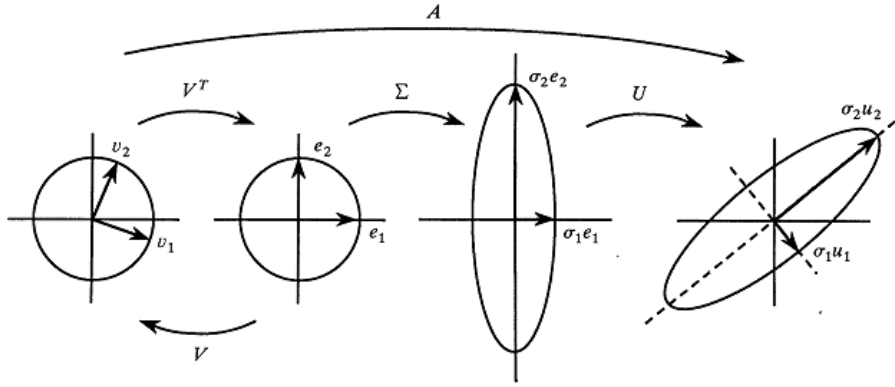
Conclusión

- $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i} > 0$ con λ_i autovalor no nulo de $A^t A$.
- $v_1 \dots v_n$ base ortonormal de autovectores de $A^t A$.
- $u_1 \dots u_r$ base ortonormal de $Im(A)$ con $u_i = \frac{1}{\sigma_i} A v_i$.
- $u_{r+1} \dots u_m$ base ortonormal de $Im(A)^\perp = Nu(A^t)$.

Es fácil verificar que si construimos U , Σ y V a partir de estas definiciones se cumplen las 4 ecuaciones planteadas anteriormente y las matrices forman la descomposición SVD de $A = U\Sigma V^t$. Además, se puede hacer un análisis similar para concluir que $u_1 \dots u_m$ es una base ortonormal de autovectores de AA^t .

Interpretación geométrica

La descomposición SVD tiene una interpretación geométrica muy interesante. Cada matriz U , Σ y V cumple una función específica.



La matriz V^t realiza un cambio de base mediante una rotación, en donde los autovectores v_i quedan alineados con los vectores canónicos e_i . Luego la matriz Σ expande o contrae el espacio sobre cada uno de los vectores canónicos. Finalmente la matriz U realiza otro cambio de base mediante una rotación.

Propiedades

- $\|A\|_2 = \sigma_1$
La norma 2 cuantifica la máxima deformación del espacio realizada por la transformación A . El hecho de que sea igual a σ_1 se corresponde con la interpretación geométrica, en donde dijimos que luego de rotar con V^t , la matriz Σ expande o contrae el espacio sobre cada dirección canónica acorde a los valores singulares $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r$.
- $\kappa_2(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$
- $\|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \dots + \sigma_r^2}$

Aplicaciones

La descomposición SVD cuantifica en los valores singulares las características de la matriz original, ya sea una transformación lineal o una matriz que representa un dataset. ¿Qué pasa si descartamos algunos valores singulares? Esto es justamente lo que hace el algoritmo de PCA. Al quedarnos solo con los valores singulares más grandes, podemos reducir la dimensión de la matriz original y aún así preservar las características más importantes. Reducir la dimensión significa menos espacio de memoria y/o tiempo de cómputo más rápido.

CML

Introducción

Dado un conjunto de pares ordenados (x_i, y_i) para $i = 1 \dots m$ buscamos una función $f(x)$ perteneciente a una familia de funciones \mathcal{F} tal que mejor aproxime los datos.

Ahora nuestra matriz ya no representa necesariamente una transformación lineal, si no que podría ser un dataset de observaciones. Los valores de y_i podrían representar alguna medición y su x_i asociado el tiempo de dicha medición.

A diferencia de los métodos de interpolación, CML no garantiza que $f(x)$ pase por todos los puntos $x_1 \dots x_m$. En cambio buscamos una función que en su comportamiento general se ajuste lo mejor posible a los datos, con la intención de poder evaluar la función en datos desconocidos y obtener una predicción lo más acertada posible.

¿Cómo podemos medir qué tan bien $f(x)$ aproxima los datos?

Como métrica base siempre consideramos el error cometido por la función al evaluarla en los puntos conocidos: $|f(x_i) - y_i|$, es decir la diferencia absoluta entre $f(x_i)$ y el valor real observado y_i .

Tomamos la función que minimice el máximo error.

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

El problema de esta métrica es que la solución es muy sensible a datos atípicos (outliers).

Tomamos la función que minimice la suma de las diferencias.

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

Tomamos la función que minimice la suma de las diferencias al cuadrado.

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

Este es el método de cuadrados mínimos y el que vamos a utilizar ya que posee propiedades prácticas que facilitan obtener la solución.

Definición

Dado un conjunto de funciones $\{\phi_1 \dots \phi_n\}$ **linealmente independientes** definimos la familia de funciones como:

$$\mathcal{F} = \{f(x) = \sum_{j=1}^n c_j \phi_j(x)\}$$

El problema de cuadrados mínimos lineales consiste en encontrar los coeficientes $c_1 \dots c_n$ tales que $f(x)$ mejor aproxime los datos:

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

Notemos que podemos reescribir el problema de forma matricial. Sean $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$ y $b \in \mathbb{R}^m$ tales que:

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

$$Ax - b = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^n c_j \phi_j(x_1) - y_1 \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^n c_j \phi_j(x_m) - y_m \end{bmatrix}$$

$$\|Ax - b\|_2^2 = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^n c_j \phi_j(x_i) - y_i \right)^2$$

Luego el problema de CML consiste en buscar x tal que:

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

¿Cómo encontramos la solución?

Para encontrar la solución nos apoyamos en que $Im(A) \oplus Nu(A^t) = \mathbb{R}^m$. Esto significa que cualquier vector de \mathbb{R}^m podemos escribirlo como una suma directa de 2 vectores, uno de $Im(A)$ y otro de $Nu(A^t)$. En particular vamos a descomponer el vector $b \in \mathbb{R}^m$ como $b = b^1 + b^2$, donde $b^1 \in Im(A)$ y $b^2 \in Nu(A^t)$.

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b^1 - b^2\|_2^2$$

$Ax - b^1 \in Im(A)$ mientras que $b^2 \in Nu(A^t) = Im(A)^\perp$. Entonces $(Ax - b^1) \perp b^2$ y por Pitágoras tenemos que:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b^1 - b^2\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} (\|Ax - b^1\|_2^2 + \|b^2\|_2^2)$$

Notemos que $\|b^2\|_2^2$ es constante, por lo tanto el problema se reduce a buscar x tal que:

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

Como $b^1 \in Im(A)$ podemos asegurar que **siempre** existe $x^* \in \mathbb{R}^n$ tal que $Ax^* = b^1$. Y en efecto x^* minimiza la norma pues $\|Ax^* - b^1\|_2^2 = 0$ es lo mínimo que puede valor una norma.

Luego x^* es la solución al problema de CML. Recordemos que $x^* = (c_1 \dots c_n)$ contiene los coeficientes de la función $f(x) = c_1 \phi_1(x) + \dots + c_n \phi_n(x)$ que planteamos para ajustarse a los datos.

Interpretación geométrica

La noción de buscar una función que se ajuste a los datos se interpreta como buscar la **proyección ortogonal** de b sobre el subespacio $Im(A) \subseteq \mathbb{R}^m$. La proyección ortogonal tiene la mínima distancia euclideana entre b y algún punto de $Im(A)$. No queremos el punto que está en $Im(A)$ sino su pre-imagen, es decir el vector $x^* \in \mathbb{R}^n$ que genera el punto Ax^* (pueden haber varios). De esta forma encontramos los coeficientes x^* que nos dan una función que mejor se ajusta a los datos pues Ax^* es lo más cerca que podemos llegar de b (las observaciones de nuestro dataset).

Unicidad

Concluimos que $Ax^* = b^1$ es la solución al problema de CML. Como estamos escribiendo a b^1 como una combinación lineal de las columnas de A , la solución es única si A tiene rango máximo, o equivalentemente, las columnas de A son linealmente independientes.

Ecuaciones normales

Si bien logramos caracterizar la solución al problema de CML, nos gustaría poder plantearlo en términos de los datos originales A y b .

Sea x^* solución al problema de CML, y recordemos que $b = b^1 + b^2$ con $b^1 \in Im(A)$ y $b^2 \in Nu(A^t)$.

$$b = b^1 + b^2 \iff b^1 = b - b^2 \iff Ax^* = b - b^2 \iff b^2 = b - Ax^*$$

Como $b^2 \in Nu(A^t)$ tenemos que:

$$A^t b^2 = A^t(b - Ax^*) = 0 \iff A^t Ax^* = A^t b$$

De esta forma logramos caracterizar el problema en función de los datos originales. Notemos que la matriz $A^t A$ es simétrica semi definida positiva, o definida positiva si A tiene rango máximo. Podemos resolver el sistema planteado con cualquiera de las técnicas vistas como la factorización de Cholesky.

No obstante, la matriz $A^t A$ puede estar mal condicionada y generar soluciones inestables. Pequeños cambios en b producen grandes cambios en la solución x^* . Para intentar remediar esto podemos buscar otra formulación de la solución mediante la factorización QR o SVD en donde no necesitemos usar la matriz $A^t A$.

Resolución usando QR

Resolución usando SVD

Error

Métodos Iterativos

Interpolación