Apuntes de teórico - Métodos Numéricos

Instituto de Matemáticas y Estadística "Rafael Laguardia"
Facultad de Ingeniería, Universidad de la República
2016 - Montevideo, Uruguay

Nota importante: El presente material forma parte de una versión **en proceso de revisión** de un texto teórico para la asignatura "Métodos Numéricos". Por lo tanto, para preparar los exámenes se debe utilizar el material de las clases teóricas y la **bibliografía recomendada**.

Índice general

Capítulo 4

Mínimos Cuadrados

4.1. Problema de ajuste general

En general es el problema geométrico de ajustar una figura a una serie de puntos según algún criterio de mínima distancia. Por ejemplo ajustar elipses a puntos del plano, ver Figura 4.1.

Los datos surgen de una figura desconocida a la cual se le agrega ruido, buscamos recuperar a partir de estos datos con ruido la figura verdadera.

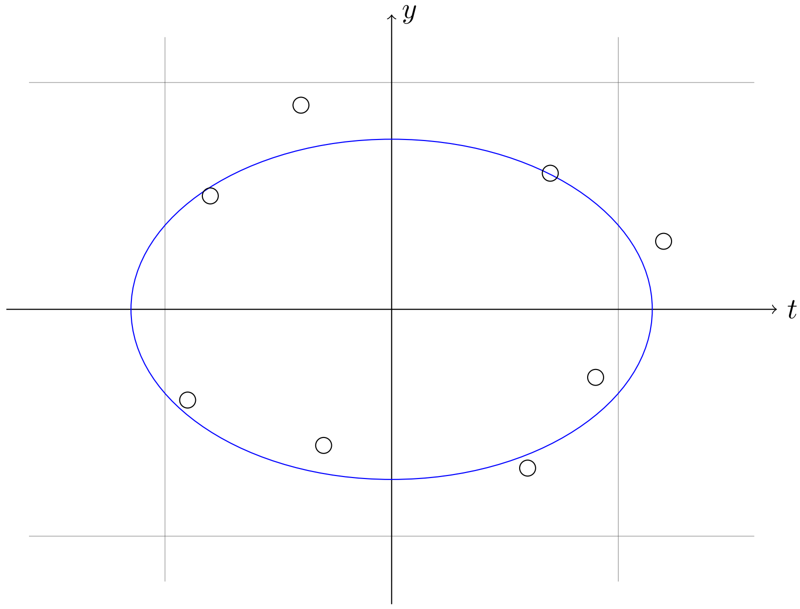

Figura 4.1: Elipse ajustada a puntos

4.2. Mínimos Cuadrados Lineales

Supongamos que tenemos ciertos datos dados por la tabla

t	y
t_1	y_1
$\vdots$	$\vdots$
t_m	y_m

y una función de ajuste a esos datos con parámetros $x_1, \cdots, x_n$, dada por $\Phi(x_1, x_2, \cdots, x_n, t) = \sum_{i=1}^{n} x_i \varphi_i(t)$. Donde los $\varphi_i(t) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ pertenecen a una familia de funciones base conocidas linealmente independientes.

Observamos que $\Phi(X, t)$ es lineal con respecto a los x_i y en general $m > n$, o sea que esperamos mas datos que parámetros de ajuste. Buscamos entonces de todas las $\Phi(X, t)$ las que mejor se ajustan a los datos según un criterio de distancia que veremos a continuación.

Definición 4.2.1. En las hipótesis hasta ahora expuestas definimos el residuo como la siguiente función,

$$R(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \begin{bmatrix} \Phi(x_1, x_2, \cdots, x_n, t_1) - y_1 \\ \Phi(x_1, x_2, \cdots, x_n, t_2) - y_2 \\ \vdots \\ \Phi(x_1, x_2, \cdots, x_n, t_m) - y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

que depende de los parámetros $x_1, x_2, \cdots, x_n$.

El problema de mínimos cuadrados lineal es encontrar $(\hat{x_1}, \hat{x_2}, \cdots, \hat{x_n})$ que minimice

$$\|R(x_1, x_2, \cdots, x_n)\|_2^2 = \sum_{j=1}^{m} \left(\Phi(x_1, x_2, \cdots, x_n, t_j) - y_j\right)^2$$

En notación matricial el problema queda planteado de la siguiente manera:

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n, \ Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m$$

$$A = \begin{bmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \cdots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \cdots & \varphi_n(t_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_1(t_m) & \varphi_2(t_m) & \cdots & \varphi_n(t_m) \end{bmatrix} \in M^{m \times n}$$

y definimos el resto como $R(X) = AX - Y$ y queremos minimizar $\|AX - Y\|_2^2$.

Teorema 4.2.1 (Ecuaciones Normales)**.** *Sean $A \in \mathcal{M}_{m\times n}(\mathbb{R})$, $Y \in \mathbb{R}^m$, $X \in \mathbb{R}^n$, entonces $\hat{X}$ minimiza $\|AX - Y\|_2^2$ si y solo si $A\hat{X} - Y$ es ortogonal a $Im(A)$ o $A^t\left(A\hat{X} - Y\right) = 0$.*

Observación 4.2.1.

- El sistema de ecuaciones $A^tAX = A^tY$ se llaman ecuaciones normales.

- Si las columnas de A son l.i. entonces $|AA^t| \neq 0$ y existe una única solución a las ecuaciones normales.
- Si las columnas de A son l.d. entonces $|AA^t| = 0$ y existen infinitas soluciones a las ecuaciones normales.

Veremos tres demostraciones del teorema 4.2.1, en las que usaremos distintas herramientas de geometría, álgebra lineal y cálculo, y que permitirán además dar distinta significación al teorema.

Demostración 1 del teorema 4.2.1: Sea $\hat{X} \in \mathbb{R}^n$ tal que $A^t\left(y - A\hat{X}\right) = 0$. Para todo $w \in \mathbb{R}^n$ vemos que $Y - Aw = \left(Y - A\hat{X}\right) + \left(A\left(\hat{X} - w\right)\right)$, entonces para todo $w \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned}
\|Y - Aw\|_2^2 &= \left\|\left(Y - A\hat{X}\right) + \left(A\left(\hat{X} - w\right)\right)\right\|_2^2 \\
&= \left\|Y - A\hat{X}\right\|_2^2 + \left\|A\left(\hat{X} - w\right)\right\|_2^2 + 2\left(A\left(\hat{X} - w\right)\right)^t\left(Y - A\hat{X}\right) \\
&= \left\|Y - A\hat{X}\right\|_2^2 + \underbrace{\left\|A\left(\hat{X} - w\right)\right\|_2^2}_{\geq 0} + 2\left(\hat{X} - w\right)^t \underbrace{A^t\left(Y - A\hat{X}\right)}_{=0} \\
&\geq \left\|Y - A\hat{X}\right\|_2^2
\end{aligned}$$

y entonces $\hat{X}$ minimiza $\|Y - AX\|_2^2$.

Supongamos por absurdo que $\hat{X} \in \mathbb{R}^n$ minimiza $\|Y - AX\|_2^2$ y $A^t\left(Y - A\hat{X}\right) = Z \neq 0$. Dado $\varepsilon > 0$ definimos $w = \hat{X} + \varepsilon Z$, por lo visto anteriormente en la demostración sabemos que

$$\begin{aligned}
\|Y - Aw\|_2^2 &= \left\|Y - A\hat{X}\right\|_2^2 + \varepsilon^2\|AZ\|_2^2 - 2\varepsilon Z^t \underbrace{A^t\left(Y - A\hat{X}\right)}_{=Z} \\
&= \left\|Y - A\hat{X}\right\|_2^2 + \varepsilon^2\|AZ\|_2^2 - 2\varepsilon\|Z\|_2^2
\end{aligned}$$

y para llegar a una contradicción con respecto a la minimalidad, buscamos un ε tal que $\|Y - Aw\|_2^2 < \left\|Y - A\hat{X}\right\|_2^2$. Tenemos dos casos, $\|AZ\|_2^2 = 0$ o $\|AZ\|_2^2 \neq 0$.

Si $\|AZ\|_2^2 = 0$, tomo cualquier $\varepsilon > 0$ y funciona. Si $\|AZ\|_2^2 \neq 0$, tomo $\varepsilon = \frac{\|Z\|_2^2}{\|AZ\|_2^2}$ y

$$\begin{aligned}
\|Y - Aw\|_2^2 &= \left\|Y - A\hat{X}\right\|_2^2 + \frac{\|Z\|_2^4}{\|AZ\|_2^2} - 2\frac{\|Z\|_2^4}{\|AZ\|_2^2} \\
&= \left\|Y - A\hat{X}\right\|_2^2 - \frac{\|Z\|_2^4}{\|AZ\|_2^2} \\
&> \left\|Y - A\hat{X}\right\|_2^2
\end{aligned}$$

$\square$

Seremos menos rigurosos en las siguientes dos demostraciones ya que la intención primordial es presentar las otras alternativas.

Demostración 2 del teorema 4.2.1: Consideremos la siguiente función que queremos minimizar:

$$\begin{aligned} s(X) = \|AX - Y\|_2^2 &= (AX - Y)^t (AX - Y) \\ &= X^t A^t AX - X^t A^t Y - Y^t AX + Y^t Y \\ &= X^t A^t AX - 2X^t A^t Y + Y^t Y \end{aligned}$$

donde hemos aplicado en la última igualdad que tanto $X^t A^t Y$ como $Y^t AX$ son escalares y uno es traspuesto del otro (es decir, $X^t A^t Y = (Y^t AX)^t$), por tanto son iguales.

Luego, como intentamos minimizar $s(X)$ imponemos $\nabla s(X) = \vec{0}$,

$\nabla s(X) = 2A^t AX - 2A^t Y = \vec{0}$

de donde se deducen las ecuaciones normales.

Puede el lector completar la demostración de ser mínimo, ya que $\nabla s(X) = \vec{0}$ solo implica punto crítico, observando los autovalores de la matriz Hessiana (si A es invertible, $A^t A$ es definida positiva).

$\square$

Demostración 3 del teorema 4.2.1: Sea $AX = Y$, sabemos que este sistema es compatible si y solo si Y pertenece al espacio de columnas de A, o sea, si $Y \in Col(A)$. En general, en los PMC, justamente, esto no sucede ya que en general son muchas más ecuaciones que incóginitas, es decir, muchos más puntos que parámetros de ajuste, lo que hace que no exista un juego de parámetros que haga que el modelo pase por todos los puntos, y por tanto se debe buscar un set de parámetros que mejor se ajuste a los datos. Entonces Y queda fuera de este subespacio formado por las columnas de A (llamémosle $S = Col(A)$), $Y \notin Col(A)$, y el vector más próximo a Y que pertenece a $Col(A)$ es la proyección de Y sobre S: $P_S(Y)$.

Este vector $P_S(Y)$ pertenece a $Col(A)$, por tanto, existe $\hat{X}$ tal que $P_S(Y) = A\hat{X}$. Además sabemos que la proyección de un vector cumple que $Y - P_S(Y) \perp S$, es decir que $Y - A\hat{X}$ es ortogonal a $Col(A)$ y por tanto es ortogonal a todos los vectores en $Col(A)$, en particular, es ortogonal a las columnas A_i de A:

$Y - A\hat{X} \perp A_i \iff < Y - A\hat{X}, A_i >= 0 \iff A_i^t(Y - A\hat{X}) = 0$

Como esto debe cumplirse para todos los $i = 1, \ldots, n$, podemos ver que $Y - A\hat{X} \in \ker(A^t)$, y así $A^t(Y - A\hat{X}) = 0$.

Es interesante observar que es posible construir las implicancias que hemos mencionado en sentido inverso para realizar desarrollar el recíproco de la demostración, aunque se entiende que la parte más ilustrativa es la que hemos tratado aquí.

$\square$

Veamos un ejemplo de mínimos cuadrados lineal.

Ejemplo 4.2.1. Supongamos que queremos aproximar los siguientes datos por una parábola,

t	y
1	3.2
2	10.2
3	21.4
4	36.3
5	55.1
6	78.3

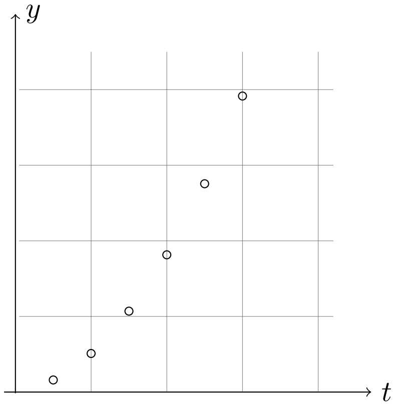

Figura 4.2: Ejemplo PMCL: Datos

En este caso, tenemos que $\Phi(x_1, x_2, x_3, t) = x_1 t^2 + x_2 t + x_3$, $\varphi_1(t) = t^2$, $\varphi_2(t) = t$, $\varphi_3(t) = 1$, y

$$Y = \begin{bmatrix} 3{,}2 \\ 10{,}2 \\ 21{,}4 \\ 36{,}3 \\ 55{,}1 \\ 78{,}3 \end{bmatrix}, \; A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \\ 25 & 5 & 1 \\ 36 & 6 & 1 \end{bmatrix}, \; A^t A = \begin{bmatrix} 2275 & 441 & 91 \\ 441 & 91 & 21 \\ 91 & 21 & 6 \end{bmatrix}$$

$$A^t Y = \begin{bmatrix} 5013{,}7 \\ 978{,}3 \\ 204{,}5 \end{bmatrix}$$

Resolviendo las ecuaciones normales vemos que $\hat{X} = \begin{bmatrix} 1{,}9893 \\ 1{,}0778 \\ 0{,}1400 \end{bmatrix}$

En general las ecuaciones normales pueden ser un problema mal condicionado para hallar la solución, por lo que buscamos métodos alternativos para solucionar las ecuaciones normales.

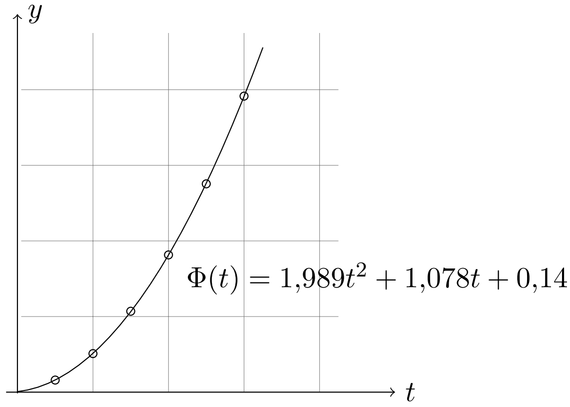

Figura 4.3: Ejemplo PMCL: Datos ajustados

4.3. Descomposición QR

La factorización QR de una matriz es la descomposición de la misma como producto de una matriz ortogonal Q por una triangular superior R.

Esta descomposición se utiliza computacionalmente para resolver sistemas lineales, se aplica a la resolución de problema de mínimos cuadrados y para hallar los valores propios de una matriz.

Teorema 4.3.1. *Sea $A \in \mathcal{M}_{m\times n}$, con $m > n$ con rango n. Existen matrices $Q \in \mathcal{M}_{m\times m}$, $R \in \mathcal{M}_{m\times n}$ tales que: $A = QR$, $Q^tQ = I_m$ o sea Q es ortogonal, y R es triangular superior o sea sus entradas $r_{i,j} = 0$ para todos los $i > j$.*

Proposición 4.3.2. *Sea $Q \in \mathcal{M}_{m\times m}$ ortogonal, o sea $Q^tQ = I_m$ entonces $\|QX\|_2 = \|X\|_2$ para todo $X \in \mathbb{R}^m$ y $Q^{-1} = Q^t$.*

Demostración. Veamos que $\|QX\|_2 = \|X\|_2$ para todo $X \in \mathbb{R}^m$.

$$\|QX\|_2^2 = (QX)^t(QX) = X^tQ^tQX = X^tX = \|X\|_2^2$$

□

Observación 4.3.1. En otras palabras, la proposición establece que las transformaciones ortonormales conservan la norma 2, o que la norma 2 es invariante ante transformaciones ortonormales.

Demostración del teorema 4.3.1: Sea A_i la columna i de A.

1. Definimos:
$$Q_1 = \frac{A_1}{\|A_1\|} \Rightarrow A_1 = r_{11}Q_1 \text{ con } r_{11} = \|A_1\|.$$

2. Veamos que $\{Q_1, \dots, Q_{k-1}\}$ es un conjunto ortonormal ($Q_i \perp Q_j \quad i \neq j$, $\|Q_i\| = 1 \quad \forall i$).

   Y que además se cumple $[A_1, \dots, A_{k-1}] = [Q_1, \dots, Q_{k-1}]$.

   Ya probamos que esto vale para $k = 1$, vamos a probarlo por inducción.

3. Buscamos Q_k tal que $\|Q_k\| = 1$ y $Q_k \perp Q_j \quad j = 1, \ldots, k-1$.

   Definimos:

$$\tilde{Q}_k = A_k - \sum_{i=1}^{k-1} r_{ik} Q_i \text{ tal que } \{Q_1, \ldots, Q_{k-1}, \tilde{Q}_k\} \text{ sea ortogonal.}$$

   Debemos encontrar los r_{ik}:

$$\begin{aligned} < \tilde{Q}_k, Q_j > &= < A_k - \sum_{i=1}^{k-1} r_{ik} Q_i, Q_j > \\ &= < A_k, Q_j > - r_{jk} \qquad \text{porque } Q_i \perp Q_j \ i \neq j. \end{aligned}$$

   Entonces el producto escalar da 0 si se define $r_{jk} =< A_k, Q_j >$ y esto quiere decir que el conjunto $\{Q_1, \ldots, Q_{k-1}, \tilde{Q}_k\}$ es ortogonal.

   Luego definimos $Q_k = \frac{\tilde{Q}_k}{\|\tilde{Q}_k\|}$ y llegamos a que $\{Q_1, \ldots, Q_k\}$ es ortonormal.

   Finalmente llegamos a que $A_k = \sum_{i=1}^{k} r_{ik} Q_i$, lo que quiere decir que $[A_1, \ldots, A_k] = [Q_1, \ldots, Q_k]$.

La descomposición QR se obtiene utilizando los valores r_{ij} como las entradas de R, las columnas $\{Q_i\}_{i=1,\ldots,n}$ halladas anteriormente como columnas de Q que se completan con columnas $\{Q_l\}_{l=n+1,\ldots,m}$ de tal manera que $\{Q_1, \ldots, Q_n, Q_{n+1}, \ldots, Q_m\}$ conformen una base ortonormal.

La relación $A = QR$ se cumplirá ya que ambas matrices fueron construidas para satisfacer $A_k = \sum_{i=1}^{k} r_{ik} Q_i$.

□

Observamos para terminar que el proceso de construcción de Q es análogo al de ortonormalización de bases de Gram-Schmidt.

4.3.1. Aplicación de QR al PMCL

Aplicamos ahora los resultados anteriores al problema de mínimos cuadrados. Suponemos que las ecuaciones normales tienen solución única, o sea es un sistema compatible determinado, entonces buscamos:

$$\begin{aligned} \min_{X \in \mathbb{R}^m} \|AX - Y\|_2^2 &= \min_{X \in \mathbb{R}^m} \|QRX - Y\|_2^2 \\ &= \min_{X \in \mathbb{R}^m} \left\|Q\left(RX - Q^tY\right)\right\|_2^2 \\ &= \min_{X \in \mathbb{R}^m} \left\|RX - Q^tY\right\|_2^2 \\ &= \min_{X \in \mathbb{R}^m} \left\|R_1X - \left(Q^tY\right)_1\right\|_2^2 + \left\|\left(Q^tY\right)_2\right\|_2^2 \end{aligned}$$

donde $R_1 \in \mathcal{M}_{n\times n}$ es la matriz formada por las primeras n filas de R, y $\left(Q^tY\right)_1 \in \mathbb{R}^n$, $\left(Q^tY\right)_2 \in \mathbb{R}^{m-n}$ son los vectores formados por los primeros n y $(m-n)$ elementos de $Q^tY \in \mathbb{R}^m$, respectivamente. Minimizamos tomando $R_1X = \left(Q^tY\right)_1$, ya que $\left\|\left(Q^tY\right)_2\right\|_2^2$ no depende de X. Deducimos que tenemos que resolver el sistema $R_1X = \left(Q^tY\right)_1$.

Observación 4.3.2.

- R_1 es triangular superior, por lo que $R_1X = \left(Q^tY\right)_1$ se resuelve con sustitución hacia atrás.
- La resolución del PMCL con QR está bien condicionada.
- Son necesarias más operaciones para encontrar QR.

Ejemplo 4.3.1. Con los datos del ejemplo 4.2.1, vemos que

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \\ 25 & 5 & 1 \\ 36 & 6 & 1 \end{bmatrix} = QR$$

donde

$$Q = \begin{bmatrix} -0{,}021 & -0{,}343 & 0{,}838 & 0{,}112 & -0{,}040 & -0{,}405 \\ -0{,}084 & -0{,}521 & 0{,}168 & -0{,}006 & 0{,}346 & 0{,}757 \\ -0{,}189 & -0{,}535 & -0{,}224 & -0{,}613 & -0{,}488 & -0{,}122 \\ -0{,}335 & -0{,}383 & -0{,}335 & 0{,}754 & -0{,}213 & -0{,}122 \\ -0{,}524 & -0{,}065 & -0{,}168 & -0{,}205 & 0{,}706 & -0{,}391 \\ -0{,}755 & 0{,}417 & 0{,}279 & -0{,}042 & -0{,}311 & 0{,}283 \end{bmatrix}$$

$$R = \begin{bmatrix} -47{,}7 & -9{,}25 & -1{,}91 \\ 0 & -2{,}35 & -1{,}43 \\ 0 & 0 & 0{,}54 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \ R_1 = \begin{bmatrix} -47{,}7 & -9{,}25 & -1{,}91 \\ 0 & -2{,}35 & -1{,}43 \\ 0 & 0 & 0{,}54 \end{bmatrix}$$

Entonces, el $X \in \mathbb{R}^3$ que minimice va a ser el X solución del sistema

$$\begin{bmatrix} -47{,}7 & -9{,}25 & -1{,}91 \\ 0 & -2{,}35 & -1{,}43 \\ 0 & 0 & 0{,}54 \end{bmatrix} X = \begin{bmatrix} -105 \\ -2{,}73 \\ 0{,}008 \end{bmatrix}$$

por lo que $X = \begin{bmatrix} 1{,}9893 \\ 1{,}0778 \\ 0{,}1400 \end{bmatrix}$.

4.4. Descomposición SVD

Una extensión del popular Teorema Espectral, generalmente trabajado en cursos iniciales de Álgebra Lineal, se conoce como Descomposición en Valores Singulares (SVD en inglés) y es de gran utilidad en múltiples aplicaciones en estadística (análisis de componente principal), teoría de control, compresión de imágenes, etc. Veremos algunos ejemplos de cálculo de esta descomposición, su aplicación al Problema de Mínimos Cuadrados Lineales y su utilización en otras aplicaciones sobre el final del capítulo.

El Teorema Espectral establece las condiciones bajo las cuales un operador o una matriz pueden ser diagonalizados (es decir, representadas como una matriz diagonal en alguna base). En particular, que cualquier matriz simétrica $A \in \mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{R})$ puede descomponerse como $A = PDP^t$ donde D es diagonal y P ortogonal.

Aquí demostraremos que una matriz cualquiera $A \in \mathcal{M}_{m\times n}(\mathbb{R})$, es decir no necesariamente cuadrada, puede descomponerse como $A = USV^t$ donde S es diagonal y U y V son ortogonales (no necesariamente una inversa de la otra).

Trabajaremos primero en las demostraciones genéricas para transformaciones lineales para ver luego como corolario la deducción de la descomposición SVD. [1]

Por tanto, en lo que sigue, V y W son espacios vectoriales con producto interno sobre un cuerpo $\mathbb{K}$.

4.4.1. Descomposición en valores singulares de una transformación lineal

Recordamos en primer lugar un par de definiciones.

Definición 4.4.1. Un operador $T : V \to V$ es autoadjunto si

$$\langle T(v), v\rangle = \langle v, T(v)\rangle \geq 0, \quad \forall v \in V$$

Definición 4.4.2. Un operador autoadjunto $T : V \to V$ se dice no negativo si

$$\langle T(v), v\rangle \geq 0, \quad \forall v \in V$$

Si T es no negativo entonces resulta fácil probar que sus valores propios son todos no negativos, en efecto si λ es valor propio de T con vector propio $v \neq \vec{0}$ entonces

$$0 \leq \langle T(v), v\rangle = \lambda\langle v, v\rangle$$

y como en el último término el segundo factor es positivo, se deduce que $\lambda \geq 0$.

Definición 4.4.3. Un operador autoadjunto $T : V \to V$ se dice no positivo si

$$\langle T(v), v\rangle > 0, \quad \forall v \in V$$

[1] Es posible saltear esta sección y continuar la lectura en el Corolario 4.4.3. Sin embargo, se recomienda apretar los dientes y seguir para comprender los conceptos subyacentes de los que surge su obtención.

En este caso los valores propios son positivos.

El siguiente lema es útil en la demostración del teorema siguiente.

Lema 4.4.1. *Sean V y W espacios vectoriales con producto interno de dimensión finita y sea $T : V \to W$ una transformación lineal, entonces $T * T$ y $TT*$ son ambos autoadjuntos, no negativos y tienen el mismo rango que T.*

Demostración. Probaremos el resultado solo para T^*T, la prueba para TT^* es análoga y qeuda a cargo del lector. Veamos primero que T^*T es autoadjunto:

$$(T^*T)^* = T^*(T^*)^* = T^*T.$$

Ahora, veamos que T^*T es no negativo. En efecto:

$$\langle T^*T(v), v\rangle = \langle T(v), T(v)\rangle \geq 0, \quad \forall v \in V.$$

Finalmente observemos que $rango(T^*T) = rango(T)$. Para esto alcanza con probar que $\ker(T) \ker(T^*T)$:
Es inmediato verificar que,

$$\ker(T) \subset \ker(T^*T).$$

Además, si $v \in \ker(T^*T)$ entonces

$$0 = \langle T^*T(v), v\rangle = \langle T(v), T(v)\rangle,$$

por lo tanto $T(v) = \vec{0}$ y consecuentemente $v \in ker(T)$. Como $ker(T^*T) = ker(T)$ se deduce inmediatamente del teorema de las dimensiones que

$$\dim(Im(T^*T)) = \dim(Im(T))$$

lo cual concluye la prueba. □

Teorema 4.4.2. *Sean V y W espacios vectoriales con $\dim(V) = n$ y $\dim(W) = m$ y sea $T : V \to W$ una transformación lineal con $rango(T) = r$.*
Entonces existe $\mathcal{A} = \{v_1, \dots, v_n\}$ base ortonormal de V, $\mathcal{B} = \{w_1, \dots, w_m\}$ base ortonormal de W y escalares $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ tales que $T(v_i) = \sigma_i w_i$ si $i = 1, \dots, r$ y $T(v_i) = \vec{0}$ si $i = r+1, \dots, n$. Es decir:

$$T(v_i) = \sigma_i w_i \qquad con \qquad \sigma_i > 0 \quad \forall i = 1, \dots, r \qquad y \qquad \sigma_i = 0 \quad i = r+1, \dots, n.$$

Demostración. Sea $R = T^*T$, por el lema anterior se sabe que R es un operador lineal en V autoadjunto, no negativo y tiene rango r (pues $r = rango(T)$).
Por el teorema espectral existe $\mathcal{A} = \{v_1, \dots, v_n\}$ base ortonormal de V tal que $R(v_i) = \lambda_i v_i$ $\forall i = 1, \dots, n$. Como $rango(T) = r$ se tiene que $\dim(\ker(T)) = n - r$ por lo tanto la base A se puede elegir de modo que $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_r > 0$ y $\lambda_i = 0$ si $i = r+1, \dots, n$. Para $i = 1, \dots, r$ definimos

$$w_i = \frac{T(v_i)}{\sigma_i}$$

donde $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$. Entonces se tiene que $T(v_i) = \sigma_i w_i$ $\forall i = 1, \dots, r$ y $T(v_i) = 0$ $\forall i = r+1, \dots, n$ tal como se quería. Falta probar que podemos construir $\mathcal{B} = \{w_1, \dots, w_n\}$ definida de este modo

y es una base ortonormal de V.
Veamos en primer lugar que $\mathcal{B}' = \{w_1, \dots, w_r\} \subset W$ es un conjunto ortonormal y consecuentemente linealmente independiente. En efecto:

$$\langle w_i, w_j\rangle = \langle \frac{T(v_i)}{\sigma_i}, \frac{T(v_j)}{\sigma_j}\rangle = \langle \frac{v_i}{\sigma_i}, \frac{T^*T(v_j)}{\sigma_j}\rangle = \frac{1}{\sigma_i\sigma_j}\langle v_i, R(v_j)\rangle = \frac{1}{\sigma_i\sigma_j}\langle v_i, \lambda_j v_j\rangle = \frac{\lambda_j}{\sigma_i\sigma_j}\langle v_i, v_j\rangle$$

Por lo tanto, usando que $A = \{v_1, \dots, v_n\}$ es una base ortonormal de V, resulta que $\mathcal{B}'$ es un conjunto ortonormal. Sea $S = SG(\{w_1, \dots, w_r\})$, entonces $\mathcal{B}'$ es una base ortonormal de S. Además se puede construir $\mathcal{B}'' = \{w_{r+1}, \dots, w_m\}$ base ortonormal de $S^\perp$ y por lo tanto $\mathcal{B} = \mathcal{B}' \cup \mathcal{B}'' = \{w_1, \dots, w_r, w_{r+1}, \dots, w_m\}$ es una base ortonormal de W con las propiedades deseadas.

$\square$

4.4.2. Descomposición en valores singulares de una matriz

Corolario 4.4.3 (Descomposición SVD)**.** *Sea $A \in \mathcal{M}_{m\times n}(\mathbb{R})$ de rango r. Entonces existen $U \in \mathcal{M}_{m\times m}(\mathbb{R})$ y $V \in \mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{R})$ ambas ortogonales y $\Sigma \in \mathcal{M}_{m\times n}(\mathbb{R})$ diagonal con rango$(\Sigma) = r$ tal que $A = U\Sigma V^t$.*

Observación 4.4.1. La matriz Σ es de la forma: $\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{c|c} \Sigma_r & 0^{r\times(n-r)} \\ \hline 0^{(m-r)\times r} & 0^{(m-r)\times(n-r)} \end{array}\right]$

donde $\Sigma_r = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \sigma_r \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{r\times r}$ matriz diagonal que cumple $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$.
A los $\{\sigma_i\}_{i\in 1\dots r}$ se les denomina *valores singulares* de A.
Además, $U = [U_1|U_2]$ con $U_1 \in \mathcal{M}_{m\times r}(R)$, $V = [V_1|V_2]$ con $V_1 \in \mathcal{M}_{n\times r}(\mathbb{R})$, y cumplen $A = U_1\Sigma_r V_1^T$.

Demostración. Basta elegir $T : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ tal que $T(x) = Ax$, entonces $A = {}_{\mathcal{C}_m}((T))_{\mathcal{C}_n}$ donde $\mathcal{C}_i$ es la base canónica de $\mathbb{R}^i$. Por el teorema anterior se tiene que existen $\mathcal{A}$ y mcB bases ortonormales de $\mathbb{R}^n$ y $\mathbb{R}^m$ respectivamente tales que $T(v_i) = \sigma_i w_i$ con $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ y $\sigma_i = 0$ si $i > r$.

Por lo tanto, ${}_{\mathcal{B}}((T))_{\mathcal{A}} = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & & & & \\ & \sigma_2 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & \sigma_r & & & \\ & & & & 0 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix}$ Además

$${}_{\mathcal{C}_m}((T))_{\mathcal{C}_n} = {}_{\mathcal{C}_m}((Id))_{\mathcal{B}\mathcal{B}}((T))_{\mathcal{A}\mathcal{A}}((Id))_{\mathcal{C}_n}$$

Las matrices de cambio de base ${}_{\mathcal{C}_m}((Id))_{\mathcal{B}}$ y ${}_{\mathcal{A}}((Id))_{\mathcal{C}_n}$ son ortogonales pues transforman una base ortonormal en otra. Por lo tanto, poniendo

$$U = {}_{\mathcal{C}_m}((Id))_{\mathcal{B}}, \qquad V = {}_{\mathcal{C}_n}((Id))_{\mathcal{A}}, \qquad \Sigma = {}_{\mathcal{B}}((T))_{\mathcal{A}}$$

se tiene que $A = U\Sigma V^t$ y además $rango(\Sigma) = r$, lo cual concluye la prueba. □

Observación 4.4.2. Los valores singulares de A son $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ donde λ_i es valor propio de $A^T A$. Se cumple además que $\lambda_i \geq 0$ ya que $A^T A$ es semidefinida positiva.

Ejemplo 4.4.1. Retomando el ejemplo 4.2.1, veamos que $A = U\Sigma V^T$ donde:

$$U = [U_1|U_2] = \left[\begin{array}{rrr|rrr} -0{,}025 & 0{,}434 & 0{,}795 & 0{,}112 & -0{,}040 & -0{,}405 \\ -0{,}099 & 0{,}536 & 0{,}109 & -0{,}006 & 0{,}346 & 0{,}757 \\ -0{,}194 & 0{,}505 & -0{,}281 & -0{,}613 & -0{,}488 & -0{,}122 \\ -0{,}339 & 0{,}339 & -0{,}375 & 0{,}754 & -0{,}213 & -0{,}122 \\ -0{,}525 & 0{,}041 & -0{,}173 & -0{,}205 & 0{,}706 & -0{,}391 \\ -0{,}750 & -0{,}391 & 0{,}324 & -0{,}042 & -0{,}311 & 0{,}283 \end{array}\right]$$

$$\Sigma = \left[\begin{array}{c} \Sigma_1 \\ \hline 0 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{rrr} 48{,}6 & 0 & 0 \\ 0 & 2{,}72 & 0 \\ 0 & 0 & 0{,}473 \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

$$V = V_1 = \begin{bmatrix} -0{,}981 & -0{,}182 & 0{,}070 \\ -0{,}191 & 0{,}823 & -0{,}535 \\ -0{,}040 & 0{,}538 & 0{,}842 \end{bmatrix}$$

y

$$X = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T Y = \begin{bmatrix} 1{,}9893 \\ 1{,}0778 \\ 0{,}1400 \end{bmatrix}$$

4.4.3. Aplicación de SVD al PMCL

Veremos a continuación, cómo se aplica la descomposición SVD al PMCL. En este caso no necesitamos asumir que las ecuaciones normales tienen solución única.

Teorema 4.4.4. *Sea $b \in \mathbb{R}^m$ y $A \in \mathcal{M}_{n\times m}(\mathbb{R})$ de rango r.*
Sea $A = U\Sigma V^t$ su descomposición SVD.
Entonces, la solución al PMCL de norma mínima es el vector dado por

$$\hat{X} = V \begin{bmatrix} \Sigma_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^t b$$

Demostración. Consideramos

$$\|b - AX\|_2 = \|U^t(b - AVV^tX)\|_2 = \|(\underbrace{U^tb}_{C} - \underbrace{U^tAV}_{\Sigma}\underbrace{V^tX}_{Z})\|_2$$

donde la primera igualdad es cierta por ser U^t ortogonal y $VV^t = Id$.
Luego, realizando los cambios de variables $Z = V^tX$ y $C = U^tb$ se tiene:

$$\|b - AX\|_2 = \|C - \Sigma Z\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} \right\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} c1 - \Sigma_r z_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \right\|_2$$

donde $z_1 \in \mathbb{R}^r$, $z_2 \in \mathbb{R}^{n-r}$, $c_1 \in \mathbb{R}^r$, y $c_2 \in \mathbb{R}^{m-r}$.

Esta norma se hace mínima cuando $c_1 = \Sigma_r z_1$ (z_2 arbitrario).
Tomando $z_2 = \vec{0} \in \mathbb{R}^{m-n}$, tendremos que $\|Z\|_2$ es mínima.
La norma $\|X\|_2$ también es mínima puesto que $\|X\|_2 = \|VZ\|_2 = \|Z\|_2$, ya que V es ortogonal.

Llamando $\hat{Z}$ a la solución de norma mínima, se tiene que

$$\hat{X} = V\hat{Z} = V \begin{bmatrix} \Sigma_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = V \begin{bmatrix} \Sigma_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^tb \Rightarrow \hat{X} = V \begin{bmatrix} \Sigma_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^tb$$

□

4.5. Descomposición de Cholesky*

Teorema 4.5.1. *Sea $B \in \mathcal{M}^{n\times n}(\mathbb{R})$ una matriz simétrica definida positiva. Es decir*

- $B = B^t$
- $X^tBX > 0 \; \forall X \neq \vec{0}$

Entonces existe una matriz $C \in \mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{R})$ triangular inferior tal que $CC^t = B$.
A esta descomposición se le denomina Descomposición de Cholesky.

Demostración. Basta observar que B es diagonalizable con todos sus valores propios positivos y vectores propios formando una base ortogonal, $B = LDL^t$. Descomponiendo D como $D = \sqrt{D}\sqrt{D}$ y operando se concluye, por lo que se dejan los detalles al lector. □

Aplicación: Uso de Cholesky para resolver p problemas de mínimos cuadrados.

Supongamos que tenemos p problemas de mínimos cuadrados de la forma $PMCL_i = \text{mín} \|b_i - AX\|$ con $X \in \mathbb{R}^n, \; A \in \mathcal{M}^{n\times m}(\mathbb{R}), \; b_i \in \mathbb{R}^m, \; i \in 1, \ldots, p$.

Planteamos p sistemas de ecuaciones normales $A^tAX = A^tb_i$, con $i = 1, \ldots, p$.
Por su parte, A^tA es simétrica y definida positiva:

- $(A^tA)^t = A^t(A^t)^t = A^tA$
- $X^tA^tAX = \langle AX, AX\rangle = \|AX\|_2 > 0 \ \forall X \neq \vec{0}$

Por tanto, A^tA admite una descomposición de Cholesky, es decir, existe $C \in \mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{R})$ triangular inferior tal que $CC^t = A^tA$.

Sea $\hat{b}_i = A^tb_i$, entonces $A^tAX = A^tb_i$ se reescribe como

$$CC^tX = \hat{b}_i \quad i \in 1,\dots,p$$

el cual puede descomponerse en dos pasos:

$$\begin{cases} C^tX = y \quad (1) \\ Cy = \hat{b}_i \quad (2) \end{cases}$$

Primero se resuelve el sistema triangular (2) para obtener $y \in \mathbb{R}^n$ y luego se resuelve el sistema triangular (1) para hallar la solución del i-ésimo problema de mínimos cuadrados.

Observación 4.5.1. La cantidad de operaciones requeridas para la resolución de los p problemas con este método es pn^2.

4.6. Mínimos Cuadrados No Lineales (PMCNL)

Veremos ahora el caso más general del problema de mínimos cuadrados. Lo que hicimos en el caso lineal era ajustar una función a ciertos datos y lineal respecto a ciertos parámetros. Supongamos como antes que tenemos ciertos datos dados por la siguiente tabla

t	y
t_1	y_1
$\vdots$	$\vdots$
t_m	y_m

y una función de ajuste $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n, t) = f(X, t)$ no lineal con respecto a los parámetros de ajuste $x_1, x_2, \dots, x_n$.

Ejemplo 4.6.1. La función $f(x_1, x_2, t) = \sin(x_1t)\, e^{x_2t}$, no es lineal con respecto a los parámetros x_1, x_2.

Definición 4.6.1. Definimos el residuo, como antes, como la siguiente función:

$$R(x_1, x_2, \cdots, x_n) = R(X) = \begin{bmatrix} f(X,t_1) - y_1 \\ f(X,t_2) - y_2 \\ \vdots \\ f(X,t_m) - y_m \end{bmatrix} = F(X) - Y$$

donde denotamos

$$F(X) = \begin{bmatrix} f(X,t_1) \\ f(X,t_2) \\ \vdots \\ f(X,t_m) \end{bmatrix}$$

que depende de los parámetros $x_1, x_2, \cdots, x_n$.

El problema de mínimos cuadrados no lineal consiste en hallar un $\hat{X}$ que alcance el siguiente mínimo:

$$\min_{X \in \mathbb{R}^n} \|F(X) - Y\|_2^2$$

Presentamos el algoritmo de Gauss-Newton para encontrar una solución al problema de mínimos cuadrados no lineal. La idea del algoritmo es suponer que tenemos una buena aproximación de la solución X_k y linealizar el residuo en un entorno de X_k. Luego resolver un problema de mínimos cuadrados lineal para obtener una mejor aproximación X_{k+1}.

$$R(Z) \approx R(X_k) + J_R(X_k)(Z - X_k)$$

Buscamos minimizar $R(Z)$ y definimos el próximo punto X_{k+1} de la sucesión en el Z en que se da este mínimo. Por tanto, haciendo el cambio de variable $P_k = X_{k-1} - X_k$, en cada paso de la iteración se deberá hallar:

$$\min_{P_k \in \mathbb{R}^n} \|R(X_k) + J_R(X_k)P_k\|_2^2$$

Observación 4.6.1. $J_R(X_k) = -J_F(X_k)$

Por tanto, esquematizamos el algoritmo de resolución de PMCNL:

Algoritmo 1 Algoritmo de Gauss-Newton (PMCNL)

0: $X_0 \in \mathbb{R}^n$
k+1: $A_k \leftarrow J_F(X_k)$
$Y_k \leftarrow Y - F(X_k)$
Resuelvo PMCL:
$P_k \leftarrow$ solución de $\min_{P_k \in \mathbb{R}^n} \|Y_k - A_k P_k\|_2^2$
$X_{k+1} \leftarrow X_k + P_k$