7.4 PROBLEMA DE MÍNIMOS CUADRADOS III

Si $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ es invertible, pero $\sigma_n \ll \sigma_1$

mucho menor

$\Rightarrow \quad K_2(A) = \dfrac{\sigma_1}{\sigma_n} \gg 1$: número de condición grande

punto 4) de la proposición de la última clase

"$Ax = b$" es un problema mal condicionado

recordar la clase sobre el número de condición:

se pueden tener errores grandes

- sobre el producto Ax, si hay error en x
- sobre la solución x, si hay error en b o en A

esto se puede entender mirando a la solución

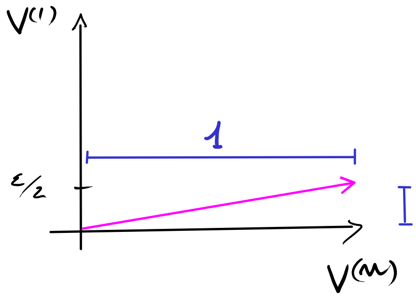
$$x(b) = \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{\sigma_k} \langle b, U^{(k)} \rangle V^{(k)}$$

esta combinación lineal puede dar mucha más importancia a $V^{(n)}$ que a $V^{(1)}$

ejemplo (extremo):

$b = U^{(1)} + U^{(n)}$, $\sigma_1 = 1$, $\sigma_n = \frac{\varepsilon}{2}$ ← ε = epsilon máquina

$$\Rightarrow x(b) = V^{(1)} + \frac{2}{\varepsilon} V^{(n)} = \frac{2}{\varepsilon}\left(V^{(n)} + \frac{\varepsilon}{2} V^{(1)} \right)$$



en precisión finita (floating point)

$1 + \frac{\varepsilon}{2} = 1 \Rightarrow \widehat{x(b)} = \frac{2}{\varepsilon} V^{(n)}$ representación numérica

hemos perdido la dirección $V^{(1)}$!

además $A\,x(b) = b = U^{(1)} + U^{(n)}$, pero $A\,\widehat{x(b)} = U^{(n)}$

hemos perdido la dirección $U^{(1)}$!

¿qué está pasando?

- recordemos que estamos tomando $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertible
- sabemos que $\{V^{(1)} .. V^{(n)}\}$ BON de $\mathbb{R}^n$

  $\Rightarrow$ todo $x \in \mathbb{R}^n$ se escribe $x = \sum_{k=1}^{n} \langle x, V^{(k)} \rangle V^{(k)}$

- hemos visto que $AV^{(k)} = \sigma_k U^{(k)}$, $k = 1..n$

  $\Rightarrow$ $Ax = \sum_{k=1}^{n} \underbrace{\sigma_k \langle x, V^{(k)} \rangle}\, U^{(k)}$ $\leftarrow$ como en el punto 2) de la proposición de la clase anterior

  los coeficientes de esta combinación lineal son productos $\sigma_k \langle x, V^{(k)} \rangle$: cuánto más grande es σ_k , tanto más A da importancia a $\langle x, V^{(k)} \rangle$ la componente de x en la dirección $V^{(k)}$

  $\hookrightarrow$ como $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n$, la que tiene más importancia es $\langle x, V^{(1)} \rangle$

- cuándo se calcula $x(b) = \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{\sigma_k} \langle b, U^{(k)} \rangle V^{(k)}$

  si hay demasiada diferencia entre σ_1 y σ_n puede pasar que la componente de $x(b)$ en la dirección $V^{(1)}$ se pierda, como en el ejemplo, o que sufra de todas formas una pérdida de precisión por errores de redondeo

  $\hookrightarrow$ se tiene un error justo donde no se debería

- algo así pasa para todos los términos de la suma: también $\langle x, V^{(2)} \rangle$ podría perder precisión si $\frac{\sigma_2}{\sigma_n}$ es demasiado grande ...

una posible solución al problema de encontrar soluciones a sistemas mal condicionados es la REGULARIZACIÓN de Tikhonov: reemplazar $Ax=b$ por un problema que tiene un número de condición más bajo, y es "parecido"

↳ se fija un parámetro $\alpha > 0$ y se busca

$$\boxed{\underset{x \in \mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} \; \|Ax-b\|_2^2 + \alpha \|x\|_2^2 \qquad \text{Problema III}}$$

- es una mezcla de los problemas I y II porque se quiere $\|Ax-b\|$ y $\|x\|$ pequeñas, pero ahora se minimizan a la vez
- α es un parametro de "trade-off": da un balance entre la importancia que tiene minimizar $\|Ax-b\|$ y la que tiene minimizar $\|x\|$:
  - α grande: es más importante que $\|x\|$ sea pequeña
  - α pequeño: es más importante que $\|Ax-b\|$ sea pequeña

teorema: sea $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, sea $\alpha > 0$ y sea

$$f_\alpha(x) = \|Ax - b\|_2^2 + \alpha \|x\|_2^2$$

1) la solución al problema de encontrar

$$\underset{x\in\mathbb{R}^n}{\arg\min}\ f_\alpha(x)$$

es dada por la solución al sistema

$$(A^tA + \alpha I)\, x = A^t b \qquad (*)$$

2) si $A = U\Sigma V^t$ es la SVD de A, la solución del sistema $(*)$ es

$$x_\alpha(b) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\sigma_k}{\sigma_k^2+\alpha} \langle b, U^{(k)}\rangle V^{(k)}$$

observaciones:

- la matriz del sistema $(*)$ es $A^tA + \alpha I$
  esta es una matriz invertible, porque su núcleo es $\{0\}$: si $x \in \operatorname{Ker}(A^tA + \alpha I)$

$$A^tAx + \alpha x = 0 \Rightarrow A^tAx = -\alpha x$$

$$\Downarrow$$

$$x = 0 \Leftarrow \underbrace{\langle A^tAx, x\rangle}_{\|Ax\|^2} = \underbrace{-\alpha\langle x, x\rangle}_{-\alpha\|x\|^2}$$

- los números $\dfrac{\sigma_k}{\sigma_k^2+\alpha}$ no sufren del problema anterior cuando $\sigma_n \ll \sigma_1$

Aplicación (MATLAB)

consideremos la matriz $A = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$

$$A \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} x_1 + x_2 \\ x_1 + x_2 + x_3 \\ x_2 + x_3 + x_4 \\ x_3 + x_4 + x_5 \\ x_4 + x_5 + x_6 \\ x_5 + x_6 \end{pmatrix}$$

en estas componentes centrales, tenemos $(Ax)_i = \frac{x_{i-1} + x_i + x_{i+1}}{3}$

promedio a 3 puntos

esta misma construcción se puede hacer en $\mathbb{R}^n$, con promedios a d puntos y, si d es impar, obtener una A tal que

$$Ax_i = \frac{1}{d} \sum_{j=i-[d/2]}^{i+[d/2]} x_j$$

↳ sea x el vector conteniente el número de casos diarios de COVID 19 detectados en España desde el 1 enero 2020:

x_1 = casos diarios el 1 enero 2020

x_2 = " 2 "

x_i = " $(i-1)$ días después del 1 enero 2020

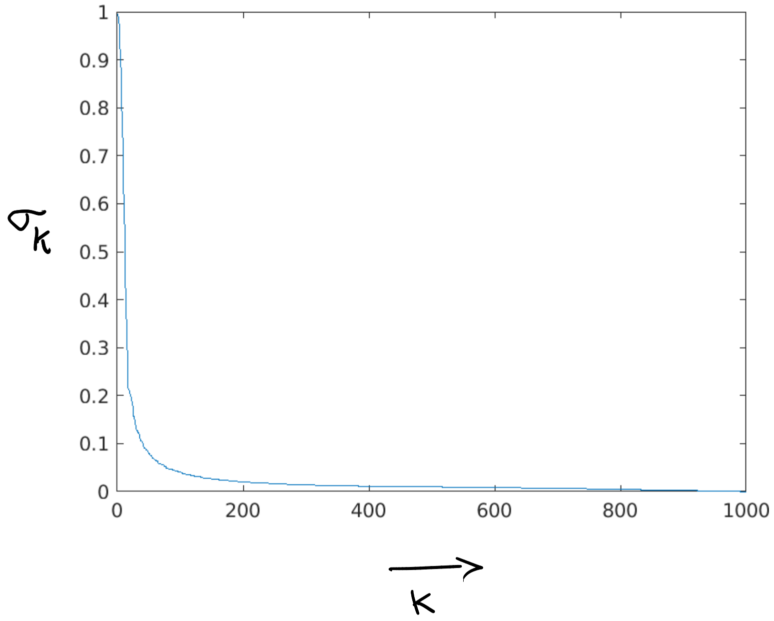
si $d = 21$, entonces $b = Ax$ es el vector que, en cada componente, registra el promedio de casos diarios de covid detectados en las 3 semanas alrededor de la fecha pregunta: conociendo la matriz de promedios A y el vector b, obtenido por promedios $b = Ax$ sobre los datos reales x, ¿es posible reconstruir x?

- es un problema $Ax = b$ donde ahora x es la incógnita
- seguramente $b \in \mathrm{Ran}(A)$, por construcción
- por otro lado, parece intuitivamente muy difícil reconstruir los datos diarios a partir de los promedios sobre 3 semanas

¿de dónde nos viene esta intuición?

del hecho que sabemos (aunque quizás no lo sabemos en estos términos) que A es una matriz mal condicionada

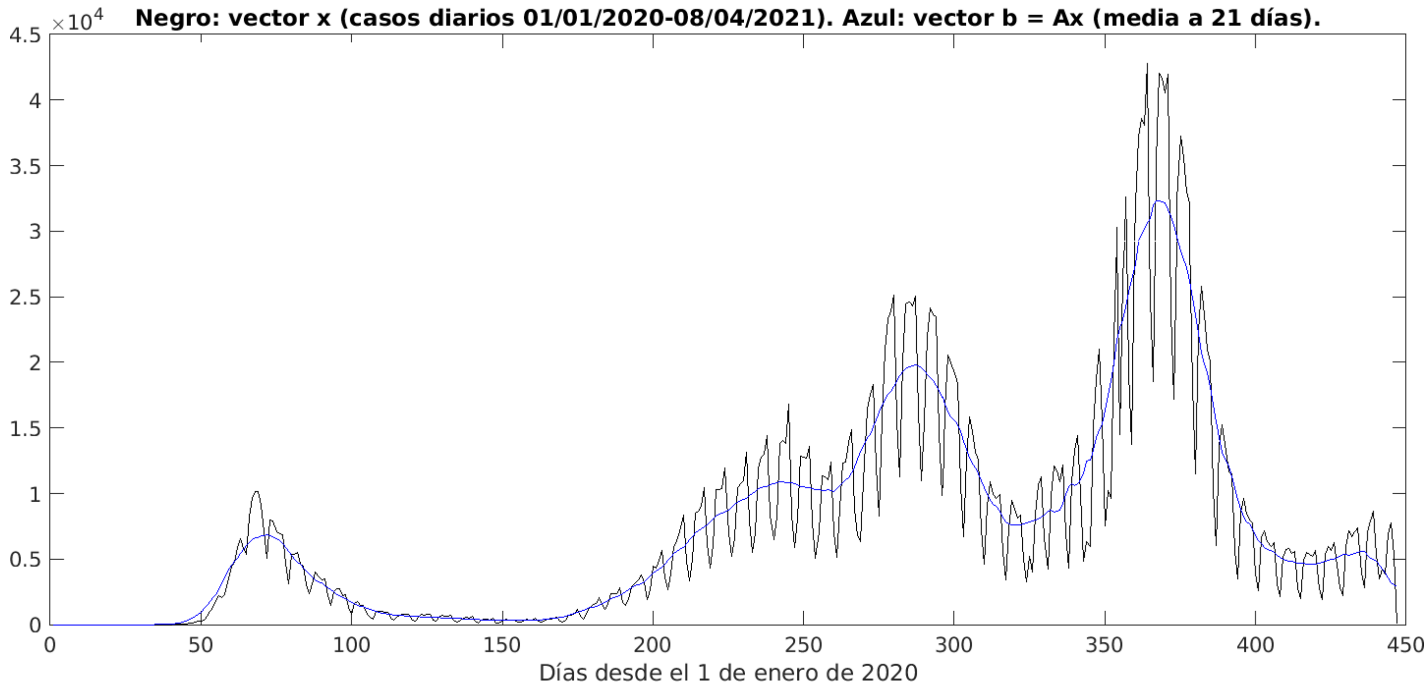
en general ni es invertible (aunque sí para ciertos valores de n y d puede serlo) pero, como $b \in \mathrm{Ran}(A)$, realmente no es esto lo que preocupa



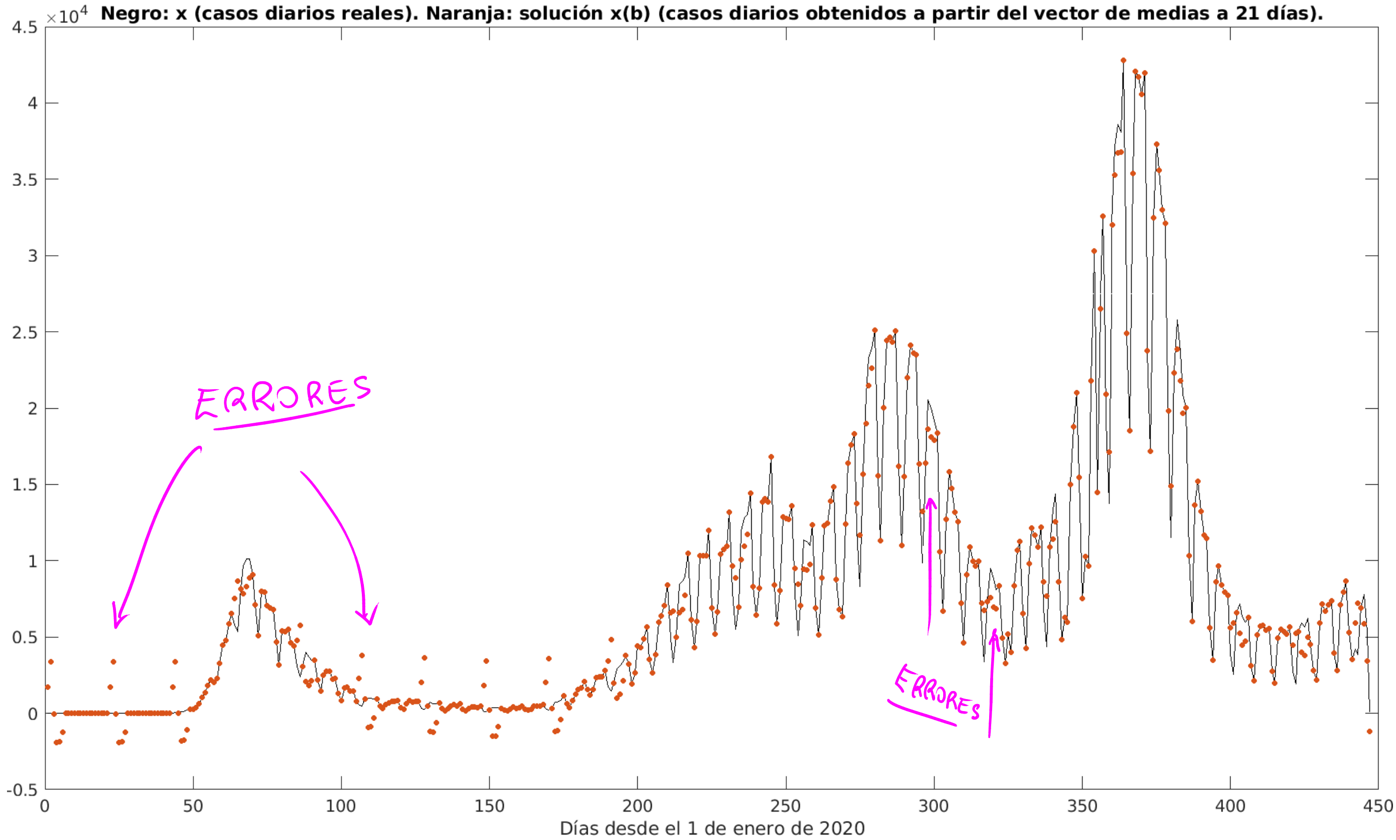
Valores singulares de la matriz A 1000×1000 de promedio sobre 101 puntos: decrecen muy rápido y van a cero

muy mal condicionada

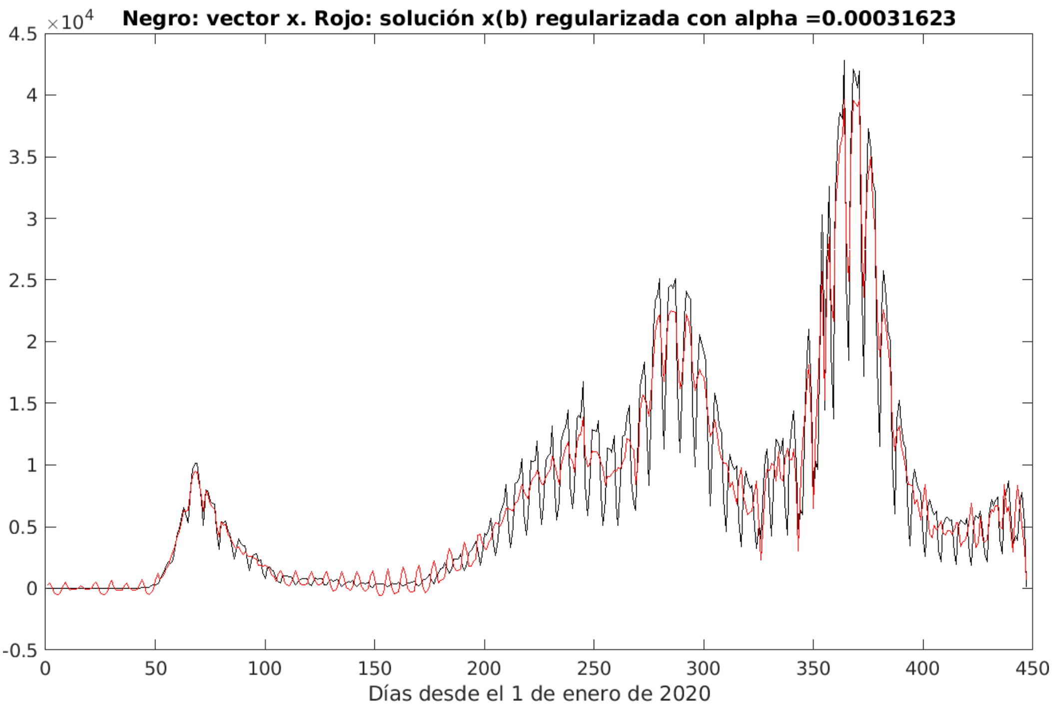
$\boxed{\text{lo que sigue son figuras generadas con el MATLAB script medias.m, que se puede descargar junto con esta clase}}$



casos diarios de covid detectados en España en 447 días, y su promedio sobre 21 días



aquí en naranja se hace un plot del vector $x(b) = \sum_{k=1}^{r} \frac{1}{\sigma_k} \langle b, U^{(k)} \rangle V^k$, obtenido a partir del vector b en azul de la figura anterior.



en rojo la solución regularizada para un cierto valor de α mínimo de f_α dado por el teorema

↳ esto tampoco es perfecto: la solución exacta no se puede recuperar por los errores numéricos!