### Métodos Numéricos

Segundo Cuatrimestre 2015

### Práctica 8

Cuadrados Mínimos Lineales



Departamento de Computación Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires

- 1. Hallar el punto del plano x+y-z=0 más cercano al punto (2,1,0) ¿Cuáles son las ecuaciones normales?
- 2. Sean  $a, b \in \mathbb{R}^n$  fijos. ¿Qué número real t hace que  $||a tb||_2$  sea mínimo?
- 3. Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Se define el espacio columna de A como el subespacio de  $\mathbb{R}^m$  generado por las columnas de A, y el espacio fila de A como el subespacio de  $\mathbb{R}^n$  generado por las filas de A.
  - (a) Probar que el espacio columna de A es Im(A).
  - (b) Probar que el espacio fila de A es  $Nu(A)^{\perp}$ .
  - (c) Probar que  $Im(A)^{\perp} = Nu(A^t)$ .
- 4. Sean  $u, v \in \mathbb{R}^n$ . Probar que  $u \perp v \Longrightarrow \|u + v\|_2^2 = \|u\|_2^2 + \|v\|_2^2$  (Teorema de Pitágoras)
- 5. Sea un subespacio  $S \subseteq \mathbb{R}^m$ , y sea P una proyección ortogonal sobre S. Probar que  $(I-P)x \in S^{\perp} \quad (\forall x \in \mathbb{R}^m)$
- 6. Sea un subespacio  $S \subseteq \mathbb{R}^m$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$  e y la proyección ortogonal de b sobre S.
  - (a) Probar que  $b y \in S^{\perp}$ .
  - (b) Usar Pitágoras para verificar que y es el único vector en S tal que

$$||b - y||_2 = \min_{s \in S} ||b - s||_2$$

- 7. Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$ .
  - (a) Probar que  $x^*$  es tal que  $||b Ax^*||_2 = \min\{||b Aw||_2 : w \in \mathbb{R}^n\}$  si y sólo si  $b Ax^* \in Im(A)^{\perp}$ .
  - (b) Usar el item anterior para demostrar que  $x \in \mathbb{R}^n$  resuelve el problema de cuadrados mínimos para el sistema Ax = b si y sólo si  $A^t Ax = A^t b$  (ecuaciones normales).
- 8. Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$ . Probar que  $x_2$  es solución de cuadrados mínimos para Ax = b si y sólo si  $x_2$  es solución del sistema

$$\left(\begin{array}{cc} I & A \\ A^t & 0 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} b \\ 0 \end{array}\right)$$

- 9. Supongamos que Ax = y. Probar que un vector  $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$  satisface  $A\hat{x} = y$  si y sólo si  $x \hat{x} \in Nu(A)$ . Demostrar que el problema de cuadrados mínimos tiene solución única si y sólo si  $Nu(A) = \{0\}$ .
- 10. Consideremos el sistema Ax = b, donde  $A \in \mathbb{R}^{n \times 2}$ , tal que

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ \vdots \\ 3 \end{bmatrix}$$

- (a) ¿Se pueden utilizar las ecuaciones normales?
- (b) Mostrar algún  $x_0 \in Nu(A)$
- (c) Encontrar la solución de Ax = b 'a mano', y verificar que es una solución del problema de cuadrados mínimos.
- (d) ¿Es ésta solución única?
- 11. Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ .
  - (a) Probar que  $A^tA$  es semidefinida positiva<sup>1</sup>.
  - (b) Si m < n demostrar que  $A^t A$  no es definida positiva.
  - (c) Si  $m \ge n$  demostrar que  $A^t A$  es definida positiva si y sólo si A tiene rango máximo.
- 12. Sea  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$   $(m \ge n)$ . Demostrar que si las columnas de A son linealmente independientes la proyección ortogonal Pb de b sobre el espacio columna de A está dado por la siguiente expresión  $Pb = A(A^tA)^{-1}A^tb$ .
- 13. Sean  $\alpha$  y  $\beta$  los parámetros obtenidos por cuadrados mínimos para la aproximación por una recta  $y = \alpha x + \beta$  al conjunto de mediciones  $\{(x_i, y_i)\}_{i=1...n}$ . Demostrar:
  - (a) El punto  $(\bar{x}, \bar{y})$  pertenece a la recta de cuadrados mínimos, donde  $\bar{x}$  representa el promedio de los valores  $\{x_i\}$ .
  - (b) Si todos los puntos  $y_i$  son iguales a una constante, entonces  $\alpha = 0$ .
  - (c) Si  $\alpha=0$ , entonces la mejor aproximación (en el sentido de cuadrados mínimos) por una función constante  $f(x)=\beta$  al conjunto de datos  $\{y_i\}_{i=1...n}$  es su promedio  $\beta=\frac{y_1+...+y_n}{n}$
  - (d) La suma total de los errores cometidos en la estimación es cero (siendo el error total  $\sum_i e_i$ , con  $e_i = \hat{y}_i y_i$  el error de la *i*-ésima estimación, y  $\hat{y}_i = \alpha x_i + \beta$ ).
  - (e) Si se multiplican los valores de  $x_i$  por c, entonces  $\alpha$  se multiplica por 1/c.
  - (f) Si se multiplican los valores de  $x_i$  por c, entonces  $\beta$  no se modifica.
  - (g) Si se multiplican los valores de  $y_i$  por d, entonces  $\alpha$  se multiplica por d.
  - (h) Si se multiplican los valores de  $y_i$  por d, entonces  $\beta$  se multiplica por d.
- 14. La recta  $y(x) = \alpha + \beta x$  debe ajustarse a los siguientes datos:

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

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

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

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

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

 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  se dice semidefinida positiva si  $0 < x^t Ax \quad (\forall x \neq 0)$ 

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

	x	-1	-1	0	0	1	2	2	2
	y	-1	0	0	1	U			
ĺ	$\overline{f}$	-4	-2	21,6	-7,3	-5,2	2	0	3

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

				5,4		
y	$^{2,1}$	11,5	28,1	41,9	72,3	91,4

18. Sea la matriz A y el vector b:

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

- (a) Obtenga la solución de cuadrados mínimos del sistema Ax = b en función de  $\epsilon$  usando las ecuaciones normales.
- (b) Intente realizar el método anterior asumiendo que  $\epsilon = 10^{-3}$  y usando aritmética de punto flotante con 6 dígitos significativos.
- (c) Calcule ahora la solución de cuadrados mínimos para  $\epsilon = 10^{-3}$  con aritmética de punto flotante con 6 dígitos significativos pero utilizando el método QR.
- 19. Dado el sistema de ecuaciones Ax = b con

$$A = \begin{pmatrix} 0.6 & 1.2 & 0.6 \\ -0.48 & -0.16 & -1.28 \\ 0.64 & 1.88 & 0.04 \end{pmatrix} b = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Y sabiendo que:

$$Q = \begin{pmatrix} -0.6 & 0 & -0.8 \\ 0.48 & -0.8 & -0.36 \\ -0.64 & -0.6 & 0.48 \end{pmatrix} R = \begin{pmatrix} -1 & -2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

donde A = QR es la factorización QR de A

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

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

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

- (a) Encontrar la matriz B y el vector c, junto con sus dimensiones, de modo que el problema de encontrar un mínimo para  $||Ax-b||_2^2 + \mu ||x-x_0||_2^2$  sea equivalente a encontrar min<sub>y</sub>  $||By-c||_2^2$ .
- (b) Demostrar que la solución  $\mathbf{x}_{cm}$  de cuadrados mínimos para la reformulación (1) es  $\mathbf{x}_{cm} = x_0 + (A^t A + \mu I)^{-1} (A^t r(x_0))$ , siendo el residuo r(x) = b Ax.

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

(a) 
$$\min_{x} ||Ax - b||_{2}^{2} = \sum_{i=r+1}^{m} (u_{i}^{t}b)^{2}$$

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

## Resolver en computadora

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

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

Para cada matriz  $A_i$ , se pide:

- (a) Calcular la factorización QR.
- (b) Determinar el rango de la matriz R.
- (c) Utilizando la factorización QR hallada, indicar cuántas soluciones de cuadrados mínimos existen para el sistema Ax = b, caracterizarlas, y dar una de ellas.
- ii (a) Resolver el siguiente problema de cuadrados mínimos:

$$\begin{pmatrix} 0.16 & 0.10 \\ 0.17 & 0.11 \\ 2.02 & 1.29 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.26 \\ 0.28 \\ 3.31 \end{pmatrix}$$

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

$$b = \begin{pmatrix} 0.27 \\ 0.25 \\ 3.33 \end{pmatrix}$$

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

#### Funciones útiles

• Usando Numpy para Python, se puede resolver el problema de cuadrados mínimos mediante SVD usando la siguiente instrucción<sup>2</sup>

$$\begin{array}{ll} \textbf{import} \ \, \text{numpy as np} \\ \text{x, residuals, rank, s} = \text{np.linalg.lstsq}\left(A, \ b\right) \end{array}$$

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

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

 $<sup>^2 \</sup>verb|http://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.linalg.lstsq.html: \\$ 

<sup>3</sup> http://www.mathworks.com/help/matlab/ref/mldivide.html

$$x\ =\ A\backslash B$$

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

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

# References

- [1] Michael T. Heath. Scientific Computing An Introductory Survey. The McGraw-Hill, 1997.
- [2] C. Meyer. Matrix Analysis and Applied Linear Algebra Book and Solutions Manual. Matrix Analysis and Applied Linear Algebra. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.
- [3] G.W. Stewart. *Introduction to matrix computations*. Computer science and applied mathematics. Academic Press, 1973.
- [4] J. Stoer and R. Bulirsch. *Introduction to Numerical Analysis*. Texts in Applied Mathematics. Springer, 2002.

<sup>4</sup>http://www.mathworks.com/help/matlab/ref/lsqr.html