Tema 13

Mínimos cuadrados

13.1. El problema de los mínimos cuadrados

En temas anteriores hemos estudiado el problema de resolver sistemas lineales de la forma $A\,x = b$; en términos de "distancia", cuando intentamos resolver tales sistemas, lo que buscamos es el conjunto de vectores x que hacen que la distancia entre $A\,x$ y b sea igual a 0:

$$\|A\,x - b\| = 0$$

(o, equivalentemente para evitar raíces cuadradas, $\|A\,x - b\|^2 = 0$). Si el conjunto de soluciones de $A\,x = b$ es vacío, con frecuencia estamos interesados en encontrar un vector x_0 que haga $\|A\,x_0 - b\|^2$ tan pequeño como sea posible (en una cierta norma). Tal vector lo denominaremos *solución de mínimos cuadrados* del sistema $A\,x = b$. Este término se deriva del hecho de que $\|A\,x - b\|$ es la raíz cuadrada de una suma de términos al cuadrado.

Dados una matriz A de dimensión $m \times n$ y un vector $b \in \mathbb{R}^m$, un vector $x_0 \in \mathbb{R}^n$ se denomina una **solución de mínimos cuadrados de** $A\,x = b$ si y sólo si para todo

$x \in \mathbb{R}^n$:

$$\|A\,x_0 - b\|^2 \leqslant \|A\,x - b\|^2\,.$$

Obsérvese que, si x_0 resuelve el sistema $A\,x = b$, entonces es una solución de mínimos cuadrados.

Los problemas de mínimos cuadrados aparecen en muchas situaciones; la más típica es la siguiente. Supongamos que un cierto experimento físico proporciona la colección de datos experimentales $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$, correspondientes a las magnitudes físicas X e Y, que teóricamente satisfacen la ley

$$Y = \alpha + \beta\,X$$

(i.e., el gráfico de la relación entre ambas es una recta). Los datos medidos proporcionan un sistema lineal de la forma

$$\begin{cases} y_1 = \alpha + \beta\,x_1\,, \\ \quad\vdots \\ y_m = \alpha + \beta\,x_m\,, \end{cases}$$

que puede escribirse usando la matriz ampliada como sigue:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & x_1 & y_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_m & y_m \end{array}\right)$$

o en formal matricial como

$$A\,x = b\,,$$

donde

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{pmatrix}\;;\quad x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}\;;\quad b = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}\,.$$

Los datos experimentales (que de manera inevitable contienen "ruido"), como los mostrados en la figura 13.1, conducen a un sistema incompatible (i.e., no existe una línea recta que pase por todos ellos), por lo que buscaremos una solución de mínimos cuadrados. La siguiente sección estudia cómo hacerlo.

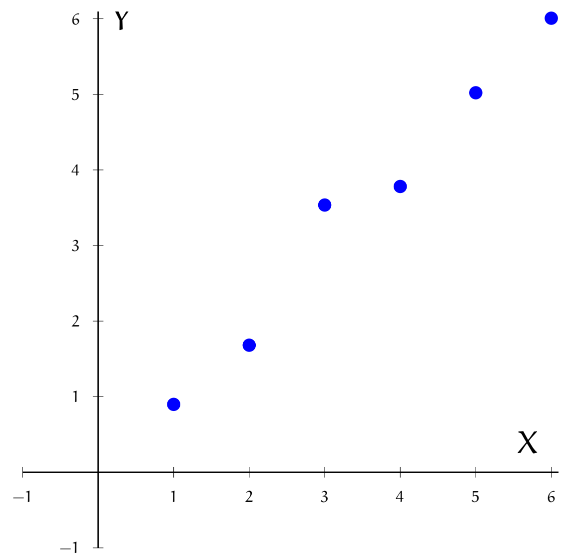
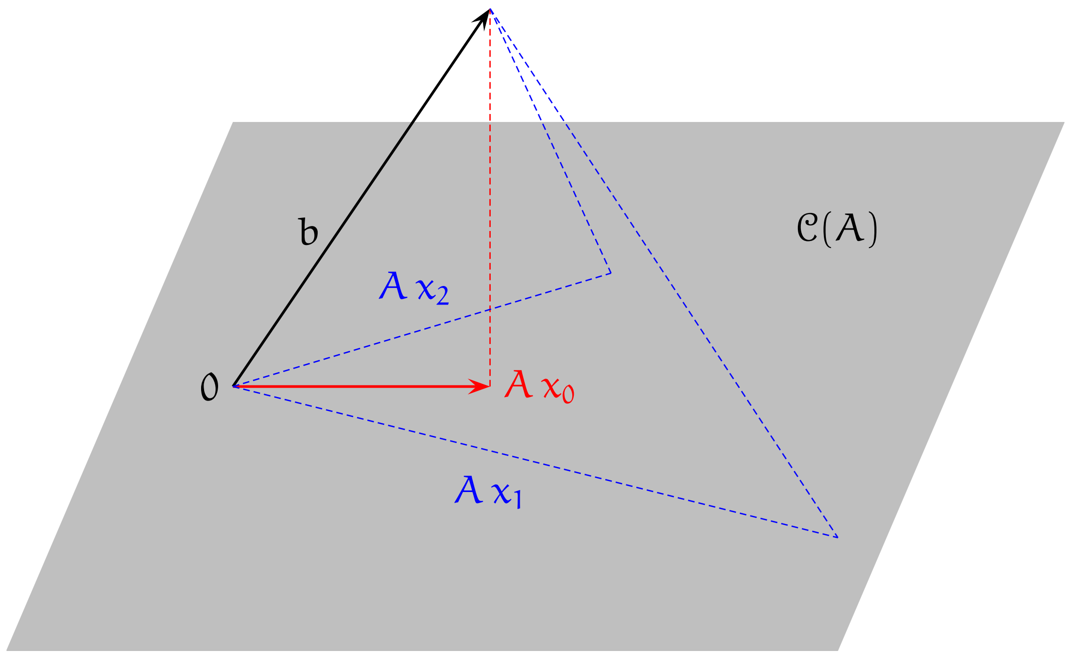


Figura 13.1: Gráfico de seis puntos experimentales, no alineados debido al ruido.

13.1.1. Interpretación geométrica de la solución de mínimos cuadrados

Es evidente que la solución de mínimos cuadrados x_0 del sistema $A\,x = b$ satisfará que el vector $A\,x_0$ pertenece al espacio columna de A, $\mathcal{C}(A)$, y además será el vector que haga que la distancia de $A\,x_0$ al vector b sea mínima.



Obviamente, la proyección ortogonal de b sobre el espacio columna de A proporcionará $A\,x_0$. Supongamos que x_0 satisface $A\,x_0 = P_{\mathcal{C}(A)}(b)$. Tal proyección cumple que $b - P_{\mathcal{C}(A)}(b)$ es ortogonal a $\mathcal{C}(A)$ y así $b - A\,x_0$ es ortogonal a cada columna A_j de A:

$$A_j^t\,(b - A\,x_0) = 0\,, \quad j = 1, \ldots, m\,.$$

Estas ecuaciones pueden ser escritas en una única expresión matricial de la forma

$$A^t\,(b - A\,x_0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A^t\,A\,x_0 = A^t\,b\,.$$

Esto prueba el siguiente teorema:

Teorema

El conjunto de soluciones de mínimos cuadrados de $A\,x = b$ coincide con el conjunto de soluciones *no vacío* del sistema $\boxed{A^t\,A\,x = A^t\,b.}$

El sistema escrito en forma matricial $A^t\,A\,x = A^t\,b$ es denominado sistema de **ecuaciones normales para** x_0. Para encontrar la solución de mínimos cuadrados de $A\,x = b$, el primer paso consiste en multiplicar por la izquierda ambos miembros por A^t. Así, obtenemos

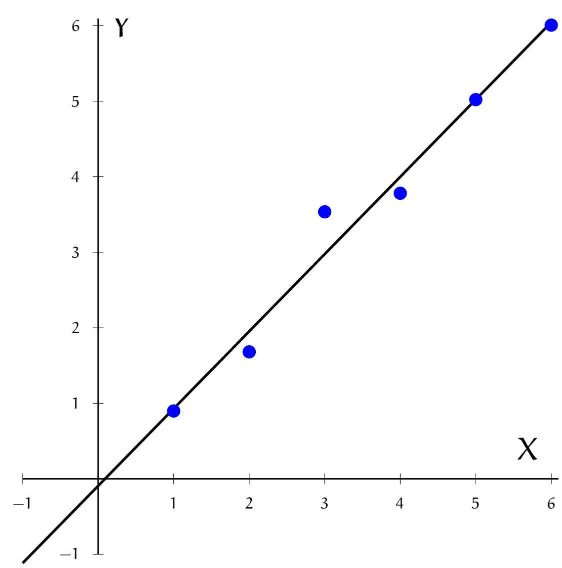
$$\begin{pmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_1 & \dots & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 1 \\ x_1 & \dots & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix},$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{pmatrix}}_{A^t\,A} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{pmatrix}}_{A^t\,b}.$$

Si la matriz $A^t\,A$ *es invertible*, el sistema $A^t\,A\,x = A^t\,b$ tiene *solución única* dada por:

$$\boxed{x_0 = (A^t\,A)^{-1}\,A^t\,b\,.}$$

Para los puntos experimentales anteriormente citados, la línea recta $Y = \alpha + \beta X$ cuyos coeficientes se encuentran por mínimos cuadrados es la que se muestra en la siguiente figura:



Si la matriz $A^t A$ *no es invertible*, entonces el sistema $A^t A x = A^t b$ tendrá infinitas soluciones (que encontraremos, por ejemplo, utilizando el método de Gauss).

Ejemplo

Vamos a obtener la solución de mínimos cuadrados del sistema $A x = b$, donde

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -6 \\ 1 & -2 \\ 1 & 1 \\ 1 & 7 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

Calculamos la solución de la forma:

$$\begin{aligned} x_0 &= (A^t A)^{-1} A^t b \\ &= \left[\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -6 & -2 & 1 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -6 \\ 1 & -2 \\ 1 & 1 \\ 1 & 7 \end{pmatrix} \right]^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -6 & -2 & 1 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \\ 6 \end{pmatrix} \\ &= \underbrace{\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 90 \end{pmatrix}}_{A^t A}{}^{-1} \underbrace{\begin{pmatrix} 8 \\ 45 \end{pmatrix}}_{A^t b} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

que es la solución de mínimos cuadrados del problema.

En general, si las columnas de $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ son linealmente independientes, la proyección ortogonal de un vector $b \in \mathbb{R}^n$ en el espacio columna de A está dado por

$$P_{\mathcal{C}(A)}(b) = A x_0 = A (A^t A)^{-1} A^t b.$$

Ejemplo

Consideremos la matriz (con columnas linealmente independientes)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix}.$$

Su espacio columna tiene dimensión 2 (un plano en $\mathbb{R}^3$). La proyección ortogonal de cualquier vector b en este subespacio se calcula usando:

$$P_{\mathcal{C}(A)}(b) = A\,(A^t\,A)^{-1}\,A^t\,b = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 5 & 2 & -1 \\ 2 & 2 & 2 \\ -1 & 2 & 5 \end{pmatrix} b\,.$$

Sea ahora

$$b = (1,0,0)^t \notin \mathcal{C}(A)\,.$$

Tenemos que

$$P_{\mathcal{C}(A)}(b) = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 5 & 2 & -1 \\ 2 & 2 & 2 \\ -1 & 2 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 5 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Resolviendo el sistema

$$A\,x = P_{\mathcal{C}(A)}(b)\,,$$

vemos fácilmente que:

$$P_{\mathcal{C}(A)}(b) = \frac{1}{6}\,(5,2,1)^t \in \mathcal{C}(A)\,.$$

Ahora consideremos

$$b = (1,1,1)^t \in \mathcal{C}(A)\,.$$

Su proyección sobre $\mathcal{C}(A)$ es lógicamente

$$P_{\mathcal{C}(A)}(b) = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 5 & 2 & -1 \\ 2 & 2 & 2 \\ -1 & 2 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = b\,.$$

Ejemplo

Consideremos el subespacio S de $\mathbb{R}^3$ descrito por:

$$S = \left\{(x, y, z)^t \in \mathbb{R}^3 \colon x + y + z = 0\right\}\ .$$

Claramente es de dimensión 2 (un plano). Podemos calcular la proyección ortogonal de cualquier vector $b \in \mathbb{R}^3$ en este subespacio como sigue. En primer lugar, hallamos una matriz cuyo espacio columna coincida con S. Para ello, usamos dos vectores linealmente independientes v_1, v_2 de S y construimos la matriz

$$A = (v_1, v_2)\ ,$$

puesto que es claro que el espacio columna de tal matriz es S. Una manera sencilla de hacerlo consiste en escribir

$$\begin{aligned} S &= \left\{(x, y, z)^t \in \mathbb{R}^3 \colon z = -x - y\right\} = \left\{(x, y, -x-y)^t \in \mathbb{R}^3\right\} \\ &= \left\{x(1, 0, -1)^t + y(0, 1, -1)^t \colon x, y \in \mathbb{R}\right\} \\ &= \mathrm{Gen}\left((1, 0, -1)^t, (0, 1, -1)^t\right)\ . \end{aligned}$$

Por tanto

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Ahora es inmediato calcular las proyecciones de cualquier vector b en S usando:

$$\begin{aligned} P_S(b) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \underbrace{\left[\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \end{pmatrix} \right]}_{(A^t\,A)^{-1}\,A^t} b \\ &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} b\,. \end{aligned}$$

Es fundamental observar que

$$\boxed{N(A^t\,A) = N(A)}$$

y

$$\boxed{\mathcal{C}(A^t\,A) = \mathcal{C}(A)\,.}$$

Nótese también el siguiente resultado:

Teorema

Dada una matriz A con columnas linealmente independientes, sea $A = Q\,R$ su factorización QR. La ecuación $A\,x = b$ tiene una solución de mínimos cuadrados única dada por

$$x_0 = R^{-1}\,Q^t\,b\,.$$

Obviamente, el siguiente resultado también se verifica:

Teorema

Dada una matriz A de dimensión $m \times n$ cuyas columnas forman un conjunto ortonormal de vectores de $\mathbb{R}^m$, la solución al problema de mínimos cuadrados es

$$x_0 = A^t\,b\,.$$

13.1.2. Proyección ortogonal y factorización QR

Sea A una matriz de columnas linealmente independientes. Si conocemos su factorización QR, podemos obtener una manera alternativa de calcular la proyección de un vector b en el espacio columna de A como sigue:

$$\begin{aligned} A\,(A^t\,A)^{-1}\,A^t &= Q\,R\,((Q\,R)^t\,Q\,R)^{-1}\,(Q\,R)^t = Q\,R(R^t\,Q^t\,Q\,R)^{-1}\,R^t\,Q^t \\ &= Q\,R\,(R^t\,I_n\,R)^{-1}\,R^t\,Q^t = Q\,R\,(R^t\,R)^{-1}\,R^t\,Q^t = Q\,R\,R^{-1}\,(R^t)^{-1}\,R^t\,Q^t \\ &= Q\,I_n\,I_n\,Q^t = Q\,Q^t\,. \end{aligned}$$

Por tanto:

$$\boxed{P_S(b) = A\,(A^t\,A)^{-1}\,A^t\,b = Q\,Q^t\,b\,.}$$

Ejemplo

Consideremos de nuevo el subespacio de $\mathbb{R}^3$

$$S = \left\{(x,y,z)^t \in \mathbb{R}^3 \colon x+y+z=0\right\}\,.$$

Vamos a obtener la matriz asociada a la proyección sobre S usando la factorización QR de la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}\,.$$

Usando Gram-Schmidt, tenemos

$$w_1 = v_1 = (1,0,-1)^t\,, \quad w_2 = v_2 - \frac{\langle w_1, v_2\rangle}{\langle w_1, w_1\rangle}\,w_1 = \frac{1}{2}\,(-1,2,-1)^t\,.$$

Normalizando, resulta

$$w_1' = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(1,0,-1)^t\,, \quad w_2' = \frac{1}{\sqrt{6}}\,(-1,2,-1)^t\,.$$

Por tanto

$$Q = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & -1 \\ 0 & 2 \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$$

y

$$\begin{aligned} A\,(A^t\,A)^{-1}\,A^t = Q\,Q^t &= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & -1 \\ 0 & 2 \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{3} \\ -1 & 2 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

como ya sabíamos.

13.2. Aproximación de funciones mediante polinomios

En muchas aplicaciones es necesario aproximar una función continua en términos de funciones de algún tipo especial. El caso más común es el de aproximar por medio de un polinomio de grado $\leqslant n$ usando bases ortonormales.

Ejemplo

Consideremos la función $f(x) = e^x$ en el intervalo $[0, 1]$. Vamos a aproximarla por medio de un polinomio perteneciente al espacio $\mathbb{P}_1$. Recordemos que el concepto de ortogonalidad se basa en el producto interno. Es fácil demostrar que la siguiente DEFINICIÓN proporciona un producto interno en el conjunto $\mathcal{C}[0, 1]$ de las funciones continuas definidas en $[0,1]$:

$$\langle f, g\rangle = \int_0^1 f(x)\, g(x)\, dx\,.$$

En primer lugar, vamos a determinar una base ORTONORMAL para el espacio vectorial $\mathbb{P}_1$. La norma (al cuadrado) de $p_0(x) = 1$ es

$$\|p_0\|^2 = \int_0^1 dx = 1\,,$$

es decir, p_0 es unitario. Ahora consideremos un polinomio $p_1(x) = ax + b$ tal que $a \neq 0$, sea ortogonal a p_0 y también tenga norma 1. Por una parte tendremos

$$\langle p_0, p_1\rangle = \int_0^1 (ax+b)\, dx = \frac{a}{2} + b = 0 \quad \Rightarrow \quad a = -2b\,.$$

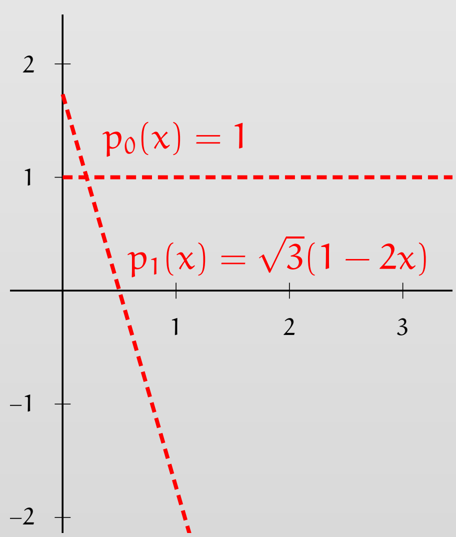
Por otra, el cuadrado de la norma de p_1 debería ser 1, luego

$$\|p_1\|^2 = \int_0^1 (b\,(-2x+1))^2\, dx = \frac{b^2}{3} = 1 \quad \Rightarrow \quad b = \sqrt{3}\,, \quad a = -2\sqrt{3}\,.$$

Así, tenemos la base ortonormal:

$$B = \left(1, \sqrt{3}(1-2x)\right)\,.$$

Obviamente no podemos escribir $f(x) = e^x = c_0\, p_0(x) + c_1\, p_1(x)$ para todo $x \in [0,1]$ (ya que la función exponencial no es un polinomio); pero sí podemos APROXIMAR $f(x) = e^x$ por un polinomio en $\mathbb{P}_1$ (i.e., encontrar la solución de mínimos cuadrados).



Tal aproximación vendrá dada por la proyección ortogonal del vector $f(x) = e^x$ sobre $\mathbb{P}_1$:

$$P_{\mathbb{P}_1}(f) = c_0 p_0 + c_1 p_1 = \|P_{p_0}(f)\| \; p_0 + \|P_{p_1}(f)\| \; p_1 \,.$$

Puesto que p_0 y p_1 son vectores unitarios:

$$\|P_{p_0}(f)\| = \langle p_0, f\rangle = \int_0^1 e^x \, dx = e^x \Big|_0^1 = e - 1$$

y

$$\|P_{p_1}(f)\| = \langle p_1, f\rangle = \int_0^1 \sqrt{3}\,(1-2x)\, e^x \, dx \underset{\substack{\uparrow \\ \text{por partes}}}{=} \sqrt{3}\,(e-3)\,.$$

Así, la mejor aproximación f_0 en el espacio vectorial $\mathbb{P}_1$ de $f(x) = e^x$ usando el producto interno dado anteriormente es

$$f_0(x) = (e-1) + \sqrt{3}\,(e-3)\,\sqrt{3}\,(1-2x) = 4e - 10 + (18 - 6e)\,x\,.$$