CAPITULO XIX. EL PROBLEMA DE LOS MINIMOS CUADRADOS: PRELIMINARES

1. SISTEMAS LINEALES DE ECUACIONES SOBREDETERMINADOS

La discusión de los problemas algebráicos de la parte anterior se había centrado exclusivamente en la ecuación $A\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$, en la cual se ha intentado hacer coincidir exactamente el vector $\mathbf{b}$ que aparece a la derecha con el vector $A\,\mathbf{x}$ que aparece a la izquierda, es decir hacer que $\mathbf{b}$ sea exactamente una combinación lineal de las columnas de A. En muchos casos, el vector $\mathbf{b}$ no se puede expresar de la forma $A\,\mathbf{x}$, y el sistema $A\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$ es **incompatible**. El problema lineal de mínimos cuadrados se acerca a la optimización si se encuentra un vector $\mathbf{x}$ que en algún sentido da la **mejor** (aunque no la perfecta) aproximación entre $A\,\mathbf{x}$ y $\mathbf{b}$.

Considérese un sistema de m ecuaciones con n incógnitas escrito en la forma

$$A\,\mathbf{x} = \mathbf{b}\ . \tag{XIX.1}$$

Aquí, A es de $m \times n$, $\mathbf{x}$ es de $n \times 1$ y $\mathbf{b}$ es de $m \times 1$. Supondremos que el rango de A es n, de lo que resulta que $m \geq n$. Si $m > n$, se dice que el sistema lineal de ecuaciones es **sobredeterminado**. Los sistemas sobredeterminados son generalmente no compatibles.

Ejemplo 1.

a) Sea dado el sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{array}{rcrcr} x_1 & + & x_2 & = & 1\ , \\ x_1 & - & x_2 & = & 3\ , \\ -\,x_1 & + & 2\,x_2 & = & -2\ . \end{array}$$

Las tres ecuaciones del sistema representano rectas en el plano. Las primeras dos se intersecan en el punto $(2, -1)$, mientras que la tercera no pasa por este punto. Entonces, no existe ningun punto común entre las tres líneas. El sistema es incompatible.

b) Sea dado el sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{array}{rcrcrcr} x_1 & + & 2\,x_2 & + & x_3 & = & 1\ , \\ 2\,x_1 & - & x_2 & + & x_3 & = & 2\ , \\ 4\,x_1 & + & 3\,x_2 & + & 3\,x_3 & = & 4\ , \\ 2\,x_1 & - & x_2 & + & 3\,x_3 & = & 5\ , \end{array}$$

Usando eliminación Gaussiana se deduce que el sistema tiene exactamente una única solución $(0.1, -0.3, 1.5)$. El sistema es compatible determinado.

c) Sea dado el sistema de ecuaciones lineales

$$\begin{array}{rcrcrcr} x_1 & + & 2\,x_2 & + & x_3 & = & 1\ , \\ 2\,x_1 & - & x_2 & + & x_3 & = & 2\ , \\ 4\,x_1 & + & 3\,x_2 & + & 3\,x_3 & = & 4\ , \\ 3\,x_1 & + & x_2 & + & 2\,x_3 & = & 3\ , \end{array}$$

Usando eliminación Gaussiana y resolviendo x_2 y x_1 en función de x_3 se deduce que el sistema tiene una infinidad de soluciones de la forma $(1 - 0.6\alpha, -0.2\alpha, \alpha)$. El sistema es compatible indeterminado.

2. EL VECTOR RESIDUAL Y EL PROBLEMA DE LOS MINIMOS CUADRADOS

Por lo general, el sistema $(XIX.1)$ no tiene solución debido a que $\mathbf{b}$ no pertenece al subespacio de $\mathcal{R}^n$ de dimensión n, generado por las columnas de A. Es frecuente en tales casos que se requiera encontrar un $\mathbf{x}$ tal que $\mathbf{b}$ esté cerca de $A\ \mathbf{x}$, es decir que minimice una norma del vector residual $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\ \mathbf{x}$. El primer problema será determinar el sentido de cercanía, es decir la norma que mide la diferencia entre $\mathbf{b}$ y $A\ \mathbf{x}$. La interpretación y la naturaleza de la solución de este problema varía dependiendo de la norma que se use. La norma más comúnmente usada es la norma euclidiana, la norma l_2. Entonces, la *solución* en mínimos cuadrados de $(XIX.1)$ es el vector $\mathbf{x}$ que hace de $||\mathbf{r}||_2 = ||\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}||_2$ un mínimo

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{R}^n} ||\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}||_2^2 \ , \qquad (XIX.2)$$

Dado que las normas no pueden ser negativas, minimizar una norma es equivalente a minimizar su cuadrado; hableremos entonces libremente de normas cuadradas y no. Según lo que se ha supuesto acerca del rango de A, la solución $\mathbf{x}$ será única.

La formulación de los mínimos cuadrados es popular sobre todo por el hecho de que resolver un problema de mínimos cuadrados lineal es más fácil que minimizar otras normas de $\mathbf{r}$. Veremos que el problema de mínimos cuadrados se puede resolver transformando la matriz A y resolviendo un sistema compatible a ella relacionado. Al contrario, minimizar la norma l_1 o la norma l_∞ es equivalente a un problema de programación lineal no diferenciable, cuya solución necesita una técnica de iteración.

Es útil pensar en el problema de los mínimos cudrados en términos de los subespacios definidos por la matriz A. El subespacio rango de A, rango(A), consiste en todos los vectores m-dimensionales que son combinaciones lineales de las columnas de A y el subespacio complementario, el subespacio nulo de A^t, nulo(A), contiene todos los vectores m-dimensionales que son $\mathbf{z}$-ortogonales a las columnas de A, es decir tales que $A^t\ \mathbf{z} = 0$. Si r denota el rango de la matriz A, entonces r es la dimensión del subespacio rango de A y $(m - r)$ es la dimensión del subespacio nulo de A^t.

Dada una matriz no nula A, cualquier vector m-dimensional $\mathbf{c}$ se puede expresar como la suma de un vector $\mathbf{c_R}$ en el rango de A, $\mathbf{c_R} \in$ rango(A), y de un vector $\mathbf{c_N}$ en el espacio nulo de A^t, $\mathbf{c_N} \in$ nulo(A^t), es decir

$$\mathbf{c} = \mathbf{c_R} + \mathbf{c_N} \ . \qquad (XIX.3)$$

Los vectores $\mathbf{c_R}$ y $\mathbf{c_N}$ son únicos y satisfacen

$$\mathbf{c_R} = A\ \mathbf{c_A} \ , \qquad A^t\ \mathbf{c_N} = 0 \ , \qquad {\mathbf{c_R}}^t \cdot \mathbf{c_N} = 0 \ , \qquad (XIX.4)$$

donde $\mathbf{c_A}$ se refiere a un vector n-dimensional cualquiera tal que $\mathbf{c_R} = A\ \mathbf{c_A}$. La unicidad de $\mathbf{c_R}$ y $\mathbf{c_N}$ implica que las componentes en el espacio rango y en el espacio nulo de vectores iguales tienen que ser iguales. En efecto,

$$\mathbf{c} = \mathbf{d} \quad \text{si y sólo si} \quad \mathbf{c_R} = \mathbf{d_R} \quad \text{y} \quad \mathbf{c_N} = \mathbf{d_N}\ . \tag{$XIX.5$}$$

Aunque $\mathbf{c_R}$ es único, el vector $\mathbf{c_A}$ es único sólo si las columnas de A son linealmente independientes.

Debido al hecho de que la norma euclídea está definida en términos del producto escalar, las relaciones ($XIX.3$) y ($XIX.4$) tienen una consecuencia muy importante:

$$||\mathbf{c}||_2^2 = \mathbf{c^t} \cdot \mathbf{c} = ||\mathbf{c_R}||_2^2 + ||\mathbf{c_N}||_2^2\ , \tag{$XIX.6$}$$

de manera que la representación de un vector en términos de sus componentes en el espacio rango y nulo separa el cuadrado de la norma euclídea en dos partes independientes. Esta propiedad no vale para otras normas.

Estas observaciones son relevantes para el problema de los mínimos cuadrados dado que permiten determinar la más pequeña posible norma euclídea del vector residual $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\ \mathbf{x}$ para todos vectores $\mathbf{x}$. Dado que ambos $\mathbf{b}$ y el vector residual $\mathbf{r}$ son vectores m-dimensionales, ambos pueden escribirse en la representación ($XIX.3$):

$$\begin{aligned} \mathbf{b} &= \mathbf{b_R} + \mathbf{b_N} \quad \text{con} \quad \mathbf{b_R} = A\ \mathbf{b_A}\ , \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r_R} + \mathbf{r_N} \quad \text{con} \quad \mathbf{r_R} = A\ \mathbf{r_A}\ . \end{aligned} \tag{$XIX.7$}$$

Combinando la definición de $\mathbf{r}$ como $\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}$ con estas relaciones, se obtiene

$$\begin{aligned} \mathbf{r} = \mathbf{r_R} + \mathbf{r_N} &= \mathbf{b} - A\ \mathbf{x} = \mathbf{b_R} + \mathbf{b_N} - A\ \mathbf{x} \\ &= \mathbf{b_R} - A\ \mathbf{x} + \mathbf{b_N} \end{aligned} \tag{$XIX.8$}$$

Un punto obvio pero crucial en esta expresión es que el vector $A\ \mathbf{x}$ está enteramente en el rango de A. Cuando se resta $A\ \mathbf{x}$ del vector $\mathbf{b}$ para crear el residual, sigue de ($XIX.5$) que la componente en el espacio rango de $\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}$ tiene que ser $\mathbf{b_R} - A\ \mathbf{x}$. En contraste, el restar $A\ \mathbf{x}$ no puede eliminar nada a la componente de b en el espacio nulo, de manera que la componente en el espacio nulo de $\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}$ es igual a $\mathbf{b_N}$. Entonces, las componentes en el espacio rango y en el nulo del vector residual satisfacen

$$\mathbf{r_R} = \mathbf{b_R} - A\ \mathbf{x} \quad \text{y} \quad \mathbf{r_N} = \mathbf{b_N}\ . \tag{$XIX.9$}$$

Como ya dicho, el problema de mínimos cuadrados consiste en minimizar la norma l_2 del vector residual. De ($XIX.6$) y ($XIX.9$) sigue que la norma euclídea del vector residual $\mathbf{r}$ para cualquier vector $\mathbf{x}$ satisface

$$||\mathbf{r}||_2^2 = ||\mathbf{b_R} - A\ \mathbf{x}||_2^2 + ||\mathbf{b_N}||_2^2 \geq ||\mathbf{b_N}||_2^2\ . \tag{$XIX.10$}$$

Dado que $\mathbf{b_N}$ se mantiene en el residual, se encontrará el mínimo de $||\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}||_2$ cuando la norma de la componente en el subespacio rango, $||\mathbf{b_R} - A\ \mathbf{x}||_2$, sea la más pequeña posible. Además, por definición $\mathbf{b_R}$ está en el rango de A, luego tiene que existir un vector $\mathbf{x}$ tal que $A\ \mathbf{x} = \mathbf{b_R}$. Para este vector particular $\mathbf{x}$, se elimina la componente de $\mathbf{b}$ en el espacio rango cuando se le resta $A\ \mathbf{x}$, que significa que $\mathbf{b} - A\ \mathbf{x} = \mathbf{b_N}$ y que la norma euclídea del vector residual es igual a su cota inferior $||\mathbf{b_N}||_2$.

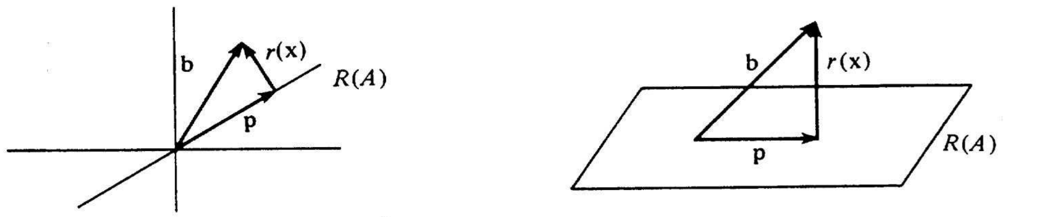
Escoger $\mathbf{x}$ de esta manera, $A\ \mathbf{x} = \mathbf{b_R}$, no sólo minimiza la norma del vector residual, sino que además fuerza al residual a estar enteramente en el espacio nulo de A^t. De esta manera se llega a dos caracterizaciones equivalentes de la solución optimal del problema de mínimos cuadrados:

$$\mathbf{x} \quad \text{minimiza} \quad ||\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}||_2 \quad \Longleftrightarrow \quad A^t\ (\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}) = \mathbf{0}\ , \tag{XIX.11}$$

$$\mathbf{x} \quad \text{minimiza} \quad ||\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}||_2 \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} A\ \mathbf{x} = \mathbf{b_R}\ , \\ \mathbf{b} - A\ \mathbf{x} = \mathbf{b_N}\ . \end{cases} \tag{XIX.12}$$

Un problema de mínimos cuadrados se dice **compatible** si su vector residual optimal es cero, en este caso $\mathbf{b_N} = 0$ y $\mathbf{b} = \mathbf{b_R}$; si éste no es el caso se dice **incompatible**.

La ortogonalidad del vector residual respecto de las filas de la matriz A corresponde al principio geométrico familiar de que la distancia más corta de un punto a un plano es la longitud de la perpendicular que los une. Aquí el punto es el vector $\mathbf{b}$ y el plano es el subespacio rango de A.



(a) $\mathbf{b} \in R^2$ and A is a 2×1 matrix of rank 1. **(b)** $\mathbf{b} \in R^3$ and A is a 3×2 matrix of rank 2.

La unicidad del vector $\mathbf{b_N}$ implica que el vector residual optimal para el problema de mínimos cuadrados es único. El vector $\mathbf{b_R}$ es también único, y el sistema $A\ \mathbf{x} = \mathbf{b_R}$ es compatible por definición. Sin embargo, el vector $\mathbf{x}$ que satisface $A\ \mathbf{x} = \mathbf{b_R}$ es único si y sólo si las columnas de la matriz A son linealmente independientes. Dado que cualquier vector $\mathbf{x}$ que satisface $A\ \mathbf{x} = \mathbf{b_R}$ es una solución de mínimos cuadrados, sigue una importante conclusión: **la solución del problema de mínimos cuadrados es única si y sólo si la matriz A es de rango n.**

Ejemplo 2.

Sean

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix}$$

con las columnas de A linealmente independientes. Por definición, cualquier vector $\mathbf{y}$ en el rango de A tiene la forma

$$\mathbf{y} = A\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} .$$

El espacio nulo de A^t consiste de vectores $\mathbf{z}$ que satisfacen

$$A^t\mathbf{z} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 + z_2 \\ z_1 + z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Las relaciones $z_1 + z_2 = 0$ y $z_1 + z_3 = 0$ implican que cualquier vector $\mathbf{z}$ del espacio nulo de A^t tiene que ser de la forma

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} x_3 \\ -x_3 \\ -x_3 \end{pmatrix}$$

para algún escalar x_3. Entonces, para buscar la representación del vector $\mathbf{b}$ como suma de vectores en el subespacio rango de A y en el subespacio nulo de A^t tiene que ser

$$\mathbf{b} = \mathbf{y} + \mathbf{z} = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_3 \\ -x_3 \\ -x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix}$$

que nos da $x_1 = x_3 = 2$ y $x_2 = -3$.

Se deduce entonces, que la representación del vector $\mathbf{b}$ como suma de vectores en el subespacio rango de A y en el subespacio nulo de A^t viene dada por

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix} = \mathbf{b_R} + \mathbf{b_N} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ -3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix} =$$

$$= A\ \mathbf{b_A} + \mathbf{b_N} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix} .$$

Aplicando $(XIX.12)$, se obtiene que la solución de mínimos cuadrados y el vector residual optimal son

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{r} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix} .$$

En este ejemplo, la solución de mínimos cuadrados es única porque A es de rango lleno.

Un aspecto crucial de la relación $(XIX.12)$ es que revela cómo cambios en el vector $\mathbf{b}$ afectan a la solución $\mathbf{x}$ y al problema de mínimos cuadrados $\min ||\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}||_2^2$. Para sistemas de ecuaciones lineales no singulares y compatibles, cambios en $\mathbf{b}$ implicaban encontrar una solución $\mathbf{x}$ diferente. Esta propiedad no se verifica para el problema de los mínimos cuadrados, cuyo analisis es más complicado.

Se supone por simplicidad que A tiene rango lleno, entonces $\mathbf{x}$ es la única solución del problema de mínimos cuadrados $\min ||\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}||_2^2$ y $\mathbf{r}$ es el vector residual optimal, $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\ \mathbf{x}$. Si $\mathbf{b}$ viene perturbado por un vector que está enteramente en el subespacio rango de A, es decir $\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{b} + \delta\mathbf{b_R}$, donde $\delta\mathbf{b_R} = A\ \delta\mathbf{x}$ para un único n-vector $\delta\mathbf{x}$, entonces

$$\tilde{\mathbf{b}}_\mathbf{R} = \mathbf{b_R} + \delta\mathbf{b_R} = \mathbf{b_R} + A\ \delta\mathbf{x} \quad \text{y} \quad \tilde{\mathbf{b}}_\mathbf{N} = \mathbf{b_N} . \qquad (XIX.13)$$

Sigue entonces de $(XIX.12)$ que la solución de mínimos cuadrados $\tilde{\mathbf{x}}$ y el residual $\tilde{\mathbf{r}}$ correspondientes a $\tilde{\mathbf{b}}$ satisfacen

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \delta\mathbf{x} \quad \text{y} \quad \tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r} \ , \tag{XIX.14}$$

mostrando que cambios en $\mathbf{b}$ en el espacio rango modifican el vector solución $\mathbf{x}$ pero no el vector residual $\mathbf{r}$. Por el contrario, si $\mathbf{b}$ viene perturbado por un vector que está enteramente en el subespacio nulo de A^t, es decir $\overline{\mathbf{b}} = \mathbf{b} + \mathbf{z}$, donde $A^t\ \mathbf{z} = \mathbf{0}$, entonces

$$\overline{\mathbf{x}} = \mathbf{x} \quad \text{y} \quad \overline{\mathbf{r}} = \mathbf{r} + \mathbf{z} \ . \tag{XIX.15}$$

mostrando que cambios en $\mathbf{b}$ en el espacio nulo modifican el vector residual $\mathbf{r}$, mientras que el vector solución $\mathbf{x}$ permanece inalterado.

Ejemplo 3.

Para ver un ejemplo especifico de estos efectos, reconsideremos el ejemplo 2:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix}$$

con las columnas de A linealmente independientes.

Primero perturbamos el vector $\mathbf{b}$ con un vector $\delta\mathbf{b_R}$ que está enteramente el en subespacio rango de A, es decir

$$\delta\mathbf{b_R} = A\ \delta\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \delta\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

y sea

$$\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{b} + \delta\mathbf{b_R} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -4 \end{pmatrix} \ .$$

La solución de mínimos cuadrados $\tilde{\mathbf{x}}$ asociada con $\tilde{\mathbf{b}}$ puede eliminar completamente el cambio hecho en $\mathbf{b}$ y se cambia por un vector $\delta\mathbf{x}$; mientras que el vector residual optimal se queda el mismo dado que $\tilde{\mathbf{b}}_\mathbf{N} = \mathbf{b_N}$. Los resultados son:

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \delta\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -2 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Por otro lado, supongamos que se perturbe el vector $\mathbf{b}$ con un vector en el subespacio nulo de A^t, por ejemplo

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} 10 \\ -10 \\ -10 \end{pmatrix}$$

de manera que

$$\overline{\mathbf{b}} = \mathbf{b} + \mathbf{z} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 10 \\ -10 \\ -10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ -10 \\ -15 \end{pmatrix} .$$

Aunque $\overline{\mathbf{b}}$ es significativamente distinto de $\mathbf{b}$, ningun posible vector $\mathbf{x}$ puede capturar la perturbación $\mathbf{z}$, que tiene que ser absorbida completamente en el vector residual optimal. La solución de mínimos cuadrados $\overline{\mathbf{x}}$ correspondiente a $\overline{\mathbf{b}}$ es entonces

$$\overline{\mathbf{x}} = \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \overline{\mathbf{r}} = \mathbf{r} + \mathbf{z} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 10 \\ -10 \\ -10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ -12 \\ -12 \end{pmatrix} .$$

3. LAS ECUACIONES NORMALES

La propiedad más significativa del vector residual optimal del problema de mínimos cuadrados es que está enteramente en el espacio nulo de la matriz A^t. En términos algebráicos, una solución $\mathbf{x}$ satisface

$$A^t\ (\mathbf{b} - A\ \mathbf{x}) = \mathbf{0}\ , \qquad (XIX.16)$$

que es equivalente a

$$A^t A\ \mathbf{x} = A^t\ \mathbf{b}\ . \qquad (XIX.17)$$

Este sistema de ecuaciones se conoce como el de las **ecuaciones normales**.

La matriz simétrica $A^t A$, conocida como la **matriz de la ecuación normal**, es semidefinida positiva para una matriz cualquiera A, y es definida positiva si y sólo si las columnas de A son linealmente independientes. Las ecuaciones normales son siempre compatibles, es decir existe siempre una solución de $(XIX.17)$ aunque $A^t A$ sea singular. Cualquier solución $\mathbf{x}$ tiene que satisfacer las ecuaciones normales, y cualquier vector $\mathbf{x}$ que satisface las ecuaciones normales tiene que ser una solución de mínimos cuadrados.

Las ecuaciones normales son de gran importancia práctica por el hecho de que ofrecen una manera directa para calcular la solución de mínimos cuadrados. Si $A^t A$ es definida positiva, es decir si A tiene rango lleno, las ecuaciones normales $(XIX.17)$ tienen solución única, que se puede encontrar usando el algoritmo de factorización de Cholesky. Si $A^t A$ es singular, se puede hallar una solución de las ecuaciones normales usando una versión de la factorización de Cholesky que incluya un intercambio simétrico. Entonces, el problema de mínimos cuadrados se puede resolver siguiendo los siguientes pasos:
(i) formar la matriz de la ecuación normal $A^t A$ y el vector $A^t\ \mathbf{b}$;
(ii) calcular la factorización de Cholesky $A^t A = L^t L$, con L triangular superior;
(iii) resolver los dos sistemas $L^t\ \mathbf{y} = A^t\ \mathbf{b}$ y $L\ \mathbf{x} = \mathbf{y}$. El vector $\mathbf{x}$ es la solución deseada.

Ejemplo 4.

Como ejemplo especifico de matriz de rango lleno, reconsideremos el ejemplo 2:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix}$$

con las columnas de A linealmente independientes. La matriz de la ecuación normal $A^t A$ y el vector A^t $\mathbf{b}$ para el vector asociado $\mathbf{b}$ son:

$$A^t\ A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad A^t\ \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ -4 \end{pmatrix}\ ,$$

y la solución de las ecuaciones normales

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -4 \end{pmatrix}$$

es

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix}$$

que es la solución de mínimos cuadrados obtenida anteriormente.

Ejemplo 5.

Para ver un ejemplo especifico de matriz de rango deficiente, consideremos una matriz variación de la matriz usada en el ejemplo anterior, creada añadiendo una columna dependente a la matriz A, y el mismo vector $\mathbf{b}$:

$$\overline{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix}$$

ahora las columnas de $\overline{A}$ son linealmente dependientes. La matriz de la ecuación normal $\overline{A}^t\overline{A}$ y el vector $\overline{A}^t$ $\mathbf{b}$ para el vector asociado $\mathbf{b}$ son:

$$\overline{A}^t\overline{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & \frac{3}{2} \\ 1 & 2 & \frac{3}{2} \\ \frac{3}{2} & \frac{3}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \overline{A}^t\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ -4 \\ -\frac{3}{2} \end{pmatrix}\ .$$

Aunque $\overline{A}^t\overline{A}$ es obviamente singular (la última columna es la media de las primeras dos columnas), las ecuaciones normales son compatibles, y el vector $\mathbf{x} = (2, -3, 0)^t$ (la solución anterior ampliada con una componente nula correspondiente a la última columna de $\overline{A}$) resuelve la ecuaciones normales. La solución de mínimos cuadrados ya no es única, y cualquiera del conjunto infinito de vectores que satisfacen las ecuaciones normales singulares per compatibles es una solución de mínimos cuadrados. Por ejemplo, $\mathbf{x_1} = (3, -2, -2)^t$ y $\mathbf{x_2} = (1, -4, 2)^t$ resuelven las ecuaciones normales y son consecuentemente soluciones de mínimos cuadrados.

Desde el punto de vista computacional, resolver el problema de mínimos cuadrados con las ecuaciones normales es eficiente: para formar $A^t A$ y $A^t\mathbf{b}$ se necesitan aproximadamente $m \cdot n^2/2$ operaciones, calcular la factorización de Cholesky usa del orden de $n^3/6$ operaciones y resolver los dos sistemas triangulares implica aproximadamente n^2 operaciones. Desafortunadamente, el uso de las ecuaciones normales presenta el problema de la estabilidad numérica, dado que el número de condición de la matriz $A^t A$ es el cuadrado del número de condición de A. Consecuentemente, la matriz de la ecuación normal está seriamente mal-condicionada si la matriz A misma está ligeramente mal-condicionada.

Ejemplo 6.

Sea

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 10^{-4} \end{pmatrix}$$

para la cual

$$\text{cond}(A) = 2.8 \times 10^4 \ .$$

La matriz de la ecuación normal asociada $A^t A$ es

$$A^t A = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 + 10^{-8} \end{pmatrix}$$

para la cual

$$\text{cond}(A^t A) = 7.8 \times 10^8 \ .$$

El mal condicionamiento de la matriz de la ecuación normal asociada puede conducir no solo a una aproximación no precisa de la solución calculada de las ecuaciones normales, sino también a una perdida de información cuando el rango numérico de A es marginal.

4. APLICACIONES

Los científicos a menudo coleccionan datos e intentan encontrar una relación funcional entre las variables. Si los datos son $n+1$ puntos del plano, es posible encontrar un polinomio de grado n o inferior que pasa por todos los puntos. Este polinomio se llama **polinomio de interpolación**. Dado que los datos tienen en general error experimental, no hay razón para pedir que las funciones pasen por todos los puntos. De hecho, polinomios de grado inferior que no pasan por los puntos de manera exacta, dan una mejor descripción de la relación entre variables. Por ejemplo, si la relación entre variables es actualmente lineal y los datos tienen un pequeño error, sería desastroso usar un polinomio de interpolación.

Dada una tabla de datos

x	x_1	x_2	$\dots$	x_m
y	y_1	y_2	$\dots$	y_m

$(XIX.18)$

deseamos encontrar una función lineal

$$y = c_0 + c_1\ x \qquad (XIX.19)$$

que mejor aproxima los datos en el sentido de mínimos cuadrados. Si se pide que

$$y_i = c_0 + c_1\ x_i \qquad \text{para} \quad i = 1, 2, \dots, m \qquad (XIX.20)$$

obtenemos un sistema de m ecuaciones en dos incognitas

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} . \qquad (XIX.21)$$

La función lineal cuyos coeficientes son la solución de mínimos cuadrados de $(XIX.21)$ viene a ser la aproximación de mínimos cuadrados a los datos con una función lineal.

Ejemplo 7.

Queremos encontrar la mejor aproximación de mínimos cuadrados con una función lineal a los siguientes datos:

x	0	3	6
y	1	4	5

Para estos datos el sistema $(XIX.21)$ es $A\ \mathbf{c} = \mathbf{y}$ con

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 3 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} , \qquad \mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix} .$$

Las ecuaciones normales, $A^t A\ \mathbf{c} = A^t\ \mathbf{y}$, se reducen a

$$\begin{pmatrix} 3 & 9 \\ 9 & 45 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 42 \end{pmatrix} .$$

La solución a este sistema es $(\frac{4}{3}, \frac{2}{3})$. Entonces la mejor aproximación de mínimos cuadrados linear es

$$y = \frac{4}{3} + \frac{2}{3}\ x .$$

Podriamos reconsiderar este ejemplo usando el vector residual $\mathbf{r}(\mathbf{c}) = \mathbf{y} - A\ \mathbf{c}$ y

$$\begin{aligned} ||\mathbf{r}(\mathbf{c})||_2^2 &= ||\mathbf{y} - A\ \mathbf{c}||_2^2 = \\ &= [1 - (c_0 + 0\ c_1)]^2 + [4 - (c_0 + 3\ c_1)]^2 + [5 - (c_0 + 6\ c_1)]^2 = \\ &= f(c_0, c_1) . \end{aligned}$$

Entonces $||\mathbf{r}(\mathbf{c})||_2^2$ puede pensarse como una función $f(c_0, c_1)$ de dos variables. El minímo de tale función se presentará cuando sus derivadas parciales son nulas:

$$\frac{\partial f}{\partial c_0} = -2(10 - 3\ c_0 - 9\ c_1) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial c_1} = -6(14 - 3\ c_0 - 15\ c_1) = 0$$

que resolviendo da el resultado anterior.

Si los datos no aparecen en relación lineal, se podria usar un polinomio de grado mayor. Es decir, para encontrar los coeficientes c_0, $c_1, \ldots, c_n$ de la mejor aproximación por mínimos cuadrados a los datos

x	x_1	x_2	$\ldots$	x_m
y	y_1	y_2	$\ldots$	y_m

$(XIX.18)$

con un polinomio de grado n, tenemos que encontrar la solución de mínimos cuadrados al sistema

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \ldots & x_m^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix} . \qquad (XIX.22)$$

Ejemplo 8.

Queremos encontrar la mejor aproximación de mínimos cuadrados con una función cuadrática a los siguientes datos:

x	0	1	2	3
y	3	2	4	4

Para estos datos el sistema $(XIX.22)$ es $A\ \mathbf{c} = \mathbf{y}$ con

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} , \qquad \mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 4 \\ 4 \end{pmatrix} .$$

Las ecuaciones normales, $A^t A\ \mathbf{c} = A^t\ \mathbf{y}$, se reducen a

$$\begin{pmatrix} 4 & 6 & 14 \\ 6 & 14 & 36 \\ 14 & 36 & 98 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 13 \\ 22 \\ 54 \end{pmatrix} .$$

La solución a este sistema es $(2.75, -0.25, 0.25)$. Entonces el polinomio cuadrático que da la mejor aproximación de mínimos cuadrados es

$$y = p(x) = 2.75 - 0.25\ x + 0.25\ x^2 .$$

EJERCICIOS.

1. Encontrar la solución de mínimos cuadrados a cada uno de los siguientes sistemas $A\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -3 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 10 \\ 5 \\ 20 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \\ -1 & -2 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 \\ -1 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ 8 \end{pmatrix}$$

2. Encontrar la mejor aproximación de mínimos cuadrados con una función lineal a los siguientes datos:

x	-1	0	1	2
y	0	1	3	9

Dibujar la función lineal y los datos en un sistema de coordenadas cartesiano.

3. Encontrar la mejor aproximación de mínimos cuadrados con una función polinomica cuadrática a los siguientes datos:

x	-1	0	1	2
y	0	1	3	9

Dibujar la función cuadrática y los datos en un sistema de coordenadas cartesiano.