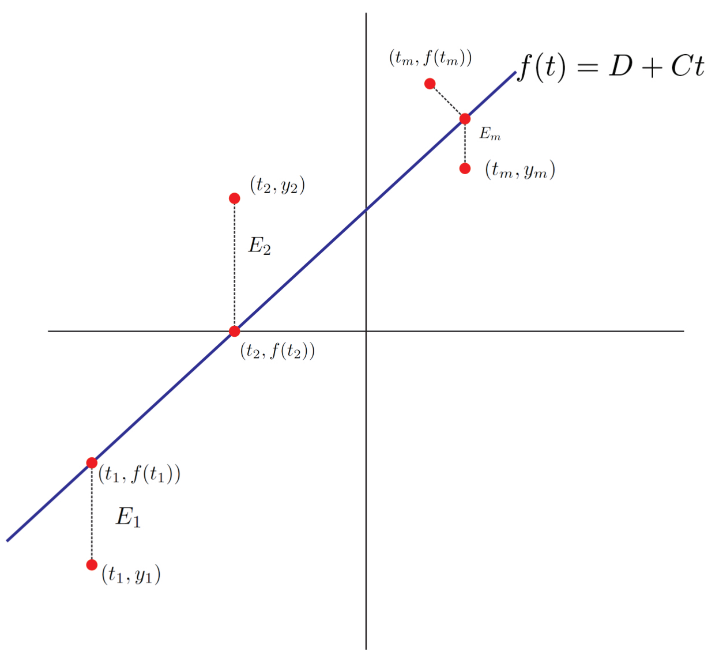
Mínimos Cuadrados

Escribir inferencias sobre fenómenos naturales basados en observaciones físicas y estimar características de grandes poblaciones mediante el examen de pequeñas muestras son preocupaciones numéricas de un fenómeno de la ciencia aplicada. Las características numéricas de un fenómeno o población a menudo se llaman parámetros y el objetivo es diseñar funciones o reglas llamadas estimadores que usan observaciones o muestras para estimar parámetoros de interés.

Por ejemplo, un investigador recolecta información mediante la realización de mediciones $y_1.y_2, ..., y_m$ en los instantes $t_1, t_2, ..., t_m$ respectivamente. Por ejemplo, puede realizar mediciones sobre el desempleo en distintas fechas durante un periodo de tiempo. Suponga que grafica los datos $(t_1, y_1), (t_2, y_2), ..., (t_m, y_m)$ como puntos en el plano.

Por causa de la distribución de tales puntos el investigador piensa que existe una correlación $y = f(x)$ entre y e t. Esta correlación puede ser una línea recta, parábola o cúbica o un polinomio de grado n. Supongamos que el investigador piensa que la relación es de la forma $y = D+Ct$. El investigador debería encontrar el valor de los parámetros C y D de tal forma que la recta $y = D + Ct$ represente el "mejor ajuste" para los datos recopilados.

Una estimación del ajuste es calcular el error E que representa la suma de los cuadrados de las distancias verticales de los puntos a la recta, esto es: $E = \sum_{i=1}^{m} (y_i - Ct_i - D)^2$ y el problema consiste en encontrar C y D que minimicen a E.



Antes de explicar la solución general haremos algunos ejemplos de mínimos cuadrados.

Ejemplo 12. Encuentre la línea recta más próxima a los puntos $(0, 6), (1, 0)$ y $(2, 0)$.

Solución. Observemos que ninguna línea recta $y = D + Ct$ pasa por estos tres puntos. En efecto, debemos encontrar D y C que satisfacen las ecuaciones:

$y(0) = 6 \longrightarrow D + C \cdot 0 = 6 \longrightarrow D = 6$
$y(1) = 0 \longrightarrow D + C \cdot 1 = 0 \longrightarrow D = -C \longrightarrow C = -6$
$y(2) = 0 \longrightarrow D + 2C = 0 \longrightarrow 6 + 2(-6) = 0$ (FALSO)

Por tanto, si $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ y $b = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ el sistema no homogéneo $3x2$, $Ax = b$ no tiene solución.

Utilizamos técnicas de minimización de cálculo para encontrar el valor mínimo del error E. Esto es:

$E(D,C) = (D + C \cdot 0 - 6)^2 + (D + C \cdot 1)^2 + (D + 2C - 0)^2$
$E(D,C) = (D - 6)^2 + (D + C)^2 + (D + 2C)^2$

Como hay dos variables C y D del cálculo sabemos que las dos derivadas parciales con respecto a C y a D deben ser cero. Esto es:

$\frac{\partial E}{\partial D} = 2(D + 6) + 2(D + C) + 2(D + 2C) = 0$

$\frac{\partial E}{\partial C} = 2(D + C) + 2(D + 2C) \cdot 2 = 0$

Reorganizando los términos, las dos ecuaciones anteriores nos quedan:

$6D + 6C = 12 \longrightarrow 3D + 3C = 6$
$6D + 10C = 0 \longrightarrow 3D + 5C = 0$

Debemos resolver el sistema no homogéneo

$$\begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \end{bmatrix}$$

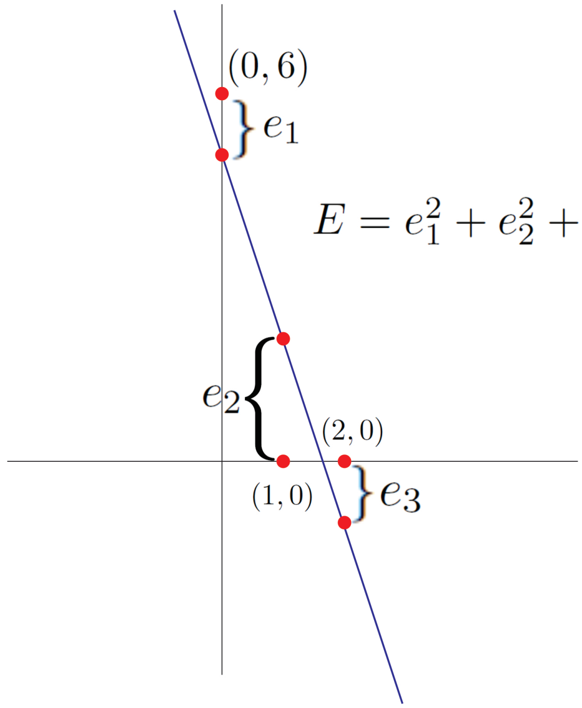
Antes de hacerlo, el lector puede verificar que $A^T A = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}$ y $A^T b = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \end{bmatrix}$ donde $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ tomado en el problema inicial.

Así, las ecuaciones obtenidas del cálculo son las ecuaciones normales del álgebra lineal. Resolviendo por el método de Gauss tenemos:

$$\left[\begin{array}{cc|c} 3 & 3 & 6 \\ 3 & 5 & 0 \end{array}\right] \tfrac{1}{3}L_3 \longleftrightarrow L_1 \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 3 & 5 & 0 \end{array}\right] - 3L_1 + L_2 \longrightarrow L_2 \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & -6 \end{array}\right]$$

$$\left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & -6 \end{array}\right] \tfrac{1}{2}L_2 \longleftrightarrow L_2 \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & -3 \end{array}\right] - L_2 + L_1 \longrightarrow L_1 \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & -3 \end{array}\right]$$

Luego $D = 5$ y $C = -3$. Por tanto, $y = 5 - 3t$ es la recta que mejor aproxima (más próximo) a los tres puntos. En t=0,1,2 la recta toma los puntos $(0, 5), (1, 2), (2, -1)$ y no los puntos $(0,6),(1,0),(2,0)$. Los errores son $e = (6,0,0) - (5,2,-1) = 1,-2,1)$ y su norma al cuadrado es $(\|e\|^2 = E = 1^2 + (-2)^2 + 1^2 = 6)$



Nota: En este libro solo consideramos errores verticales porque hemos supuesto de que solo las observaciones y_i están sujetas a error, esto es, se supone que las t_i son constantes sin errror, piensen en ellas como puntos exactos en el tiempo (como suelen ser). Si los t_i están también sujetos a variación, entonces los errores horizontales y verticales deben ser considerados en la figura anterior y una teoría más complicada conocida como los mínimos cuadrados totales emerje.

Aproximación por una recta de orden $m > 1$

Muy a menudo los científicos tienen que trabajar con grandes cantidades de datos para encontrar relaciones entre las variables de un problema. Supongamos que se busca la recta $y = \alpha + mt$ que mejor represente las observaciones $(t_1, b_|), (t_2, b_2), ..., (t_k, b_k)$. Estamos tratando de resolver un sistema de k ecuaciones con dos incógnitas:

$$\begin{array}{lll} \alpha + & mt_1 = & b_1 \\ \alpha + & mt_2 = & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \alpha + & mt_k = & b_k \end{array} \text{ o } Ax = b \text{ donde } A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_k \end{bmatrix} \text{ y } b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix}$$

En general, este sistema no tiene solución es el espacio columna de A es muy delgado (máximo de dimensión dos) y b es casi seguro que está fuera del espacio columna de A. Asi que la mejor recta $\alpha + mt$ pierde los puntos por una distancia vertial $E_1, E_2, ..., E_K$, $\varepsilon_i = |y(t_i) - b_i| = |\alpha + mt_i - b_i|$ y la línea recta de mínimos cuadrados minimiza a $E = \sum_{i=1}^{k} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{k} (\alpha + mt_i - b_i)^2$. Por tanto, el objetivo es encontrar valores para α y m tal que $E = e_1^2 + e_2^2 + ... + e_k^2$ es mínima. Como E es una función de α y m, del cálculo sabemos que las derivadas parciales con respecto a α y m deben ser cero.

$$0 = \frac{\partial E}{\partial \alpha} = 2 \sum_{i=1}^{k} (\alpha + mt_i - b_i)$$
$$0 = \frac{\partial E}{\partial m} = 2 \sum_{i=1}^{k} (\alpha + mt_i - b_i)t_i$$

Al reordenar los términos produce dos ecuaciones en las incógnitas α y m:

$$(\sum_{i=1}^{k} 1) \cdot \alpha + m(\sum_{i=1}^{k} t_i) = \sum_{i=1}^{k} b_i$$

$$(\sum_{i=1}^{k} t_i) \cdot \alpha + m(\sum_{i=1}^{k} t_i^2) = \sum_{i=1}^{k} b_i t_i$$

Como $A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_k \end{bmatrix}$ y $b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix}$ y $x = \begin{bmatrix} \alpha \\ m \end{bmatrix}_{2x1}$

La matriz producto $A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ t_1 & t_2 & \cdots & t_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{k} 1 & \sum_{i=1}^{k} t_i \\ \sum_{i=1}^{k} t_i & \sum_{i=1}^{k} t_i^2 \end{bmatrix}$

y del lado derecho, $A^T b = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ t_1 & t_2 & \cdots & t_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{k} b_i \\ \sum_{i=1}^{k} b_i t_i \end{bmatrix}$

Por tanto el sistema de ecuaciones puede ser escrito como: $A^T Ax = A^T b$ Así el problema de encontrar una solución por mínimos cuadrados es reducido a encontrar una solución exacta del sistema de ecuaciones normales asociado y de la sección anterior se sabe que el sistema normal es siempre consistente aunque no necesariamente tiene solución única.

En nuestro caso, el sistema normal tiene solución única ya que los t_i son números distintos y por tanto las dos columnas de A son linealmente independientes así que $RangA = 2$ y se demostró que $Rang(A^T A) = Rang(A)$, así $A^T A$ es una matriz de tamaño $2x2$ de rango 2 y por tanto, es invertible.

Luego el sistema $A^T Ax = b$ tiene solución única dada por $x = (A^T A)^{-1} A^T b$ y la suma de los cuadrados de los errores es $\sum_{k=1}^{k} E_i^2 = \sum_{i=1}^{k} (\alpha + mt_i - b_i)^2 = (Ax - b)^T (Ax - b)$

Observación 8. Antes de examinar ejemplos numéricos demostremos que el sistema normal $A^T Ax = A^T b$ tiene solución única sin usar los resultados de la sección anterior.

Teorema 5. *Sea A una matriz mxn, entonces las siguientes afirmaciones son equivalentes:*
a. Los vectores columnas de A son linealmente independientes
b. $A^T A$ es invertible.

Demostración. *a.* Suponga que A tiene vectores columnas linealmente independientes. Como A^TA es una matriz cuadrada de tamaño nxn podemos demostrar que el sistema lineal homogéneo $A^TAx = 0$ tiene solamente la solución trivial. Sea x cualquier solución de $A^TAx = 0$ entonces Ax está en el espacio nulo de A^T y también Ax está en el espacio columna de A. Pero, por teorema, $N(A^T)$ y $C(A)$ son ortogonales y complementarios, así, $Ax = 0$. Como A tiene columnas linealmente independientes, resulta que $x = 0$ $(N(A) = \{0\})$

$b \longrightarrow a$. Es claro, ya que si existe $x \neq 0$ tal que $Ax = 0$ entonces $A^TAx = 0$ por tanto, $x \in N(A^TA)$ lo que contradice que $N(A^TA) = \{0\}$ por ser A^TA invertible.

□

Observación 9. El lector puede observar que en general la matriz A dada en $\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$ no es invertible y por tanto no se puede dividir el término $(A^TA)^{-1}$ en A^{-1} veces $(A^T)^{-1}$ pues de ser así obtenemos $\hat{x} = A^{-1}(A^T)^{-1}A^Tb = A^{-1}b$ lo que sabíamos pues en este caso, el sistema $Ax = b$ tiene solución y no es necesario pasar a ecuaciones normales.

Ejemplo 13. Encuentre la recta que da el mejor ajuste para los datos $\{(1, 2), (2, 3), (3, 5), (4, 7)\}$.

Solución. En este caso la matriz A es dada por: $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$ y $b = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}$

$A^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix}$ y $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$ entonces $A^TA = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 10 \\ 10 & 30 \end{bmatrix}$

$A^Tb = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 17 \\ 51 \end{bmatrix} = z$ luego $(A^TA)^{-1} = \frac{1}{20} \begin{bmatrix} 30 & -10 \\ -10 & 4 \end{bmatrix}$ y la solución es

$$x = (A^TA)^{-1}bz = \frac{1}{20} \begin{bmatrix} 30 & -10 \\ -10 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 17 \\ 51 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{34}{20} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1.7 \end{bmatrix}$$

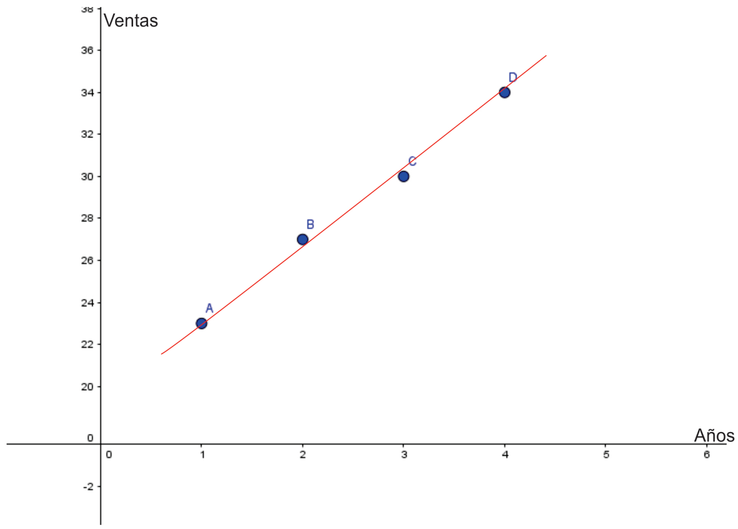
Luego $y = 0 + 1.7x = 1.7x$ es la recta que mejor aproxima estos cuatro puntos.

Observación 10. El lector puede observar que en general la matriz A dada en $\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$ no es invertible y por tanto no se puede dividir el término $(A^TA)^{-1}$ en A^{-1} veces $(A^T)^{-1}$ pues de ser así obtenemos $\hat{x} = A^{-1}(A^T)^{-1}A^Tb = A^{-1}b$ lo que sabíamos pues en este caso, el sistema $Ax = b$ tiene solución y no es necesario pasar a ecuaciones normales.

Ejemplo 14. Una pequeña empresa ha estado en el negocio durante cuatro años y ha registrado ventas anuales (en decenas de miles de dólares) de la siguiente manera:

Año	1	2	3	4
Ventas	23	27	30	34

Cuando estos datos se trazan como se muestra en la figura vemos que aunque los puntos no se encuentran exactamente en una línea recta, no obstante parece ser una tendencia linea. Predecir ventas para cualquier año futuro si esta tendencia continúa.



Encontremos la línea $f(t) = \alpha + \beta t$ que mejor encaja los datos en el sentido de mínimos cuadrados si:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \text{ y } b = \begin{bmatrix} 23 \\ 27 \\ 30 \\ 34 \end{bmatrix} \text{ y } x = \begin{bmatrix} \alpha \\ 3 \end{bmatrix}$$

Entonces la discusión anterior garantiza que x es la solución de las ecuaciones normales, es decir:

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 10 \\ 10 & 30 \end{bmatrix}$$

$$A^T b = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 23 \\ 27 \\ 30 \\ 34 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 114 \\ 203 \end{bmatrix}$$

La solución es: $x = (A^T A)^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 114 \\ 203 \end{bmatrix} = \frac{1}{20} \begin{bmatrix} 30 & -10 \\ -10 & 40 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 114 \\ 203 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 19.5 \\ 3.6 \end{bmatrix}$

Por lo que predecimos que las ventas en el año t serán $f(t) = 19.5 + 3.6t$. Por ejemplo, las ventas estimadas para el año cinco son 375.000. Para tener una idea de cuán cerca está la línea de mínimos cuadrados pasando por los puntos dados.

Sea $\varepsilon = Ax - b$ y calculamos la suma de los cuadrados de los errores para ser:

$\sum_{i=1}^{m} \varepsilon_i^2 = \varepsilon^T \varepsilon = (Ax - b)^T (Ax - b) = 0.2$

Problema general de los mínimos cuadrados. Solución geométrica

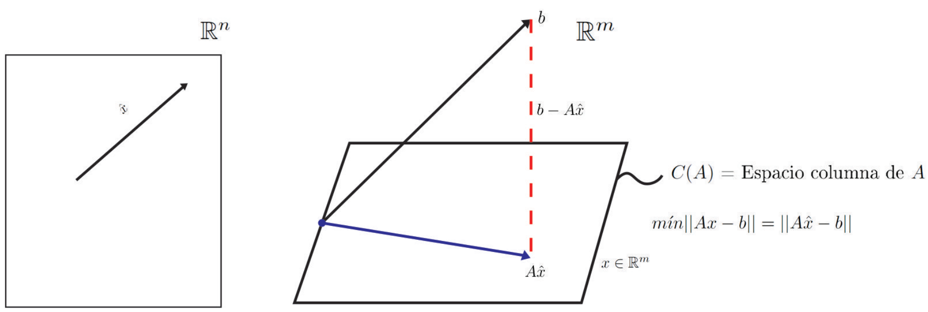
Ahora vamos a reemplazar la teoría de mínimos cuadrados basada en el cálculo clásico presentada en la sección anterior con un desarrollo de subespacios vectoriales de $\mathbb{R}^n$ más moderno. Además de ser sencillo, el enfoque geométrico moderno sitúa a la imagen de mínimos cuadrados en un enfoque mucho más nítido. Además, ver conceptos desde más de una perspectiva genera generalmente una comprensión más profunda, y esto es particularmente cierto para la teoría de mínimos cuadrados.

Problema General de los mínimos cuadrados: Dado un sistema inconsistente, el problema general de los mínimos cuadrados consiste en encontrar un vector x que minimiza la cantidad:

$$||Ax - b||^2 = \sum_{k=1}^{m} \varepsilon_i^2$$

Encontremos una solución geométrica del problema general de mínimos cuadrados. para ello consideremos $C(A)$ el espacio columna de A. Para cada vector x de tamaño $nx1$ el vector Ax pertenece a $C(A)$. Así a medida que x varía sobre $\mathbb{R}^n$, el vector Ax varía sobre todo $C(A)$.

Geométricamente resolver el problema de mínimos cuadrados significa encontrar un vector $\hat{x}$ de $\mathbb{R}^n$ tal que $A\hat{x}$ es el vector en $C(A)$ más próximo a b. (Recuerde que b no pertenece a $C(A)$ pues $Ax = b$ no es consistente).



Sabemos del teorema de la mejor aproximación que el vector en $C(A)$ más próximo de b es la proyección ortogonal de b en $C(A)$ y por tanto el vector $b - A\hat{x}$ es ortogonal a todos los vectores del espacio columna de A y como el espacio del complemento ortogonal columna de A es el espacio nulo a la izquierda de A entonces $b - A\hat{x}$ está en el espacio nulo a la izquierda de A.
Es decir, una solución $\hat{x}$ por mínimos cuadrados de $Ax = b$ debe satisfacer $A^T(b - A\hat{x}) = 0$ o equivalentemente $A^TAx = A^Tb$. Podemos resumir esto en el siguiente teorema:

Teorema 6. *Sea A una matriz mxn y b un vector de $\mathbb{R}^m$ tal que el sistema $Ax = b$ no es consistente entonces:*

1. El conjunto de todas las soluciones de mínimos cuadrados es precisamente el conjunto de soluciones del sistema de ecuaciones normales $A^TAx = A^Tb$

2. Hay una única solución por mínimos cuadrados sí y solo sí $RangA = n$. Esta solución es dada por $\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$.

Observación 11. Cuando $Ax = b$ es consistente entonces el error $\varepsilon = Ax - b$ es cero y el conjunto solución para $Ax = b$ es el mismo como el conjunto solución de mínimos cuadrados.

Ejemplo 15 (Mejor aproximación cuadrática)**.** Si lanzamos una pelota, sería una locura encajar la trayectoria por una línea recta. Una parábola $b = C + Dt + Et^2$ permite que la bola suba y baje (b es la altura en el tiempo t). Si bien, el camino real no es una parábola perfecta, la teoría de los proyectiles empieza con esa aproximación.

Nuestro problema ahora es: Ajustar una curva cuadrática $y = C + Dt + Et^2$ a $n - datos$ $\{(t_1, b_1), (t_2, b_2), \ldots, (t_n, b_n)\}$

En efecto, si los $n - datos$ están sobre la parábola se debe tener las ecuaciones

$$y(t_1) = b_1 = C + Dt_1 + Et_1^2$$

$$y(t_2) = b_2 = C + Dt_2 + Et_2^2$$

$$\vdots$$

$$y(t_n) = b_n = C + Dt_n + Et_n^2$$

El sistema lo podemos escribir en la forma $b = A\mu$ donde

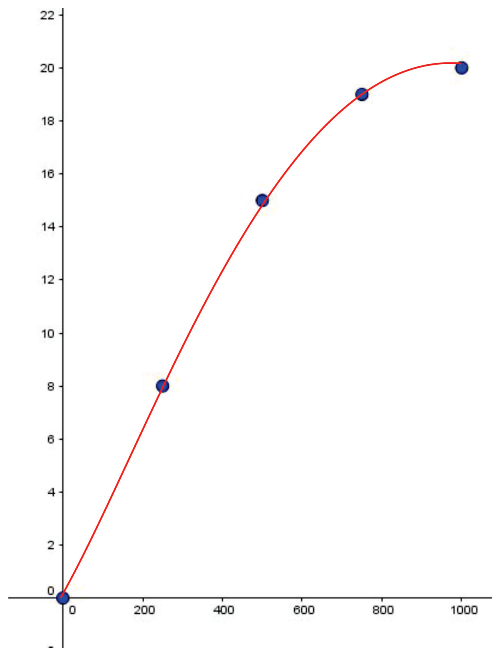
$$b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} ; A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 \\ 1 & t_2 & t_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & t_n & t_n^2 \end{bmatrix} \text{ y } \mu = \begin{bmatrix} C \\ D \\ E \end{bmatrix}$$

El teorema de mínimos cuadrados nos dice que la parábola más próxima $a + bt + ct^2$ se obtiene al escoger un $\hat{x} = (a, b, c) \in \mathbb{R}^3$ solución de la ecuación normal $A^T A\hat{x} = A^T b$ y si cuando al menos tres de los t_i son diferentes entonces $A^T A$ es invertible y la solución es dada por $\hat{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$.

Ejemplo 16. Un misil es lanzado desde territorio enemigo y su posición en vuelo es observada por dispositivos de rastreo de radar en las siguientes posiciones:

Posición	0	250	500	750	1000
Altura	0	8	15	19	20

Suponga que nuestras fuentes de inteligencia indican que los misiles enemigos están programados para seguir un camino de vuelo parabólico, un hecho que parece ser consistente con el diagrama obtenido al trazar las observaciones sobre el sistema de coordenadas. Predecir hasta qué punto el misil aterriza.



Solución. Primero encontremos la parábola $y = a + bt + +ct^2$ que mejor ajusta los datos observados en el sentido de los mínimos cuadrados. Después calculamos dónde el misil aterrizó mediante el cálculo de las raíces de y. Con el fin de evitar números que tengan magnitudes relativamente grandez, podemos escalar los datos considerando una unidad como 1000 millas. Así:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0.25 & 0.0625 \\ 1 & 0.5 & 0.25 \\ 1 & 0.75 & 0.3625 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad x = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} \text{ y } b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.008 \\ 0.015 \\ 0.019 \\ 0.02 \end{bmatrix}$$

Solución. y si $\varepsilon = Ax - b$ es el error, entonces el objetivo es encontrar una solución por mínimos cuadrados k que minimiza: $\sum_{i=1}^{5} \varepsilon_i^2 = (Ax - b)^T (Ax - b)$

Sabemos que la solución por mínimos cuadrados es dada por la solución del sistema de ecuaciones normales: $A^T Ax = A^T b$ que nos da:

$$\begin{bmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828125 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.062 \\ 0.04375 \\ 0.0349375 \end{bmatrix}$$

La solución es $a = -2.286x10^{-4}$, $b = 3.983x10^{-2}$, $c = -1.943x10^{-2}$ y la parábola de menor cuadrado es:

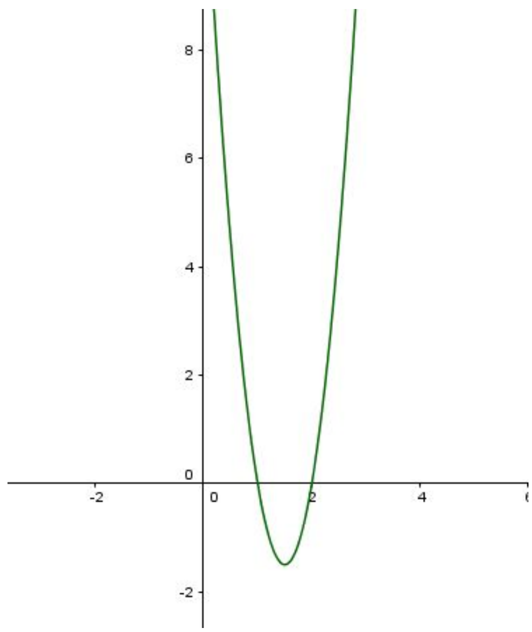
$$y = -0.0002286 + 0.03983t + -0.01943t^2$$

para estimar dónde el misil aterriza, determinamos dónde esta parábola cruza al eje horizontal aplicando la fórmula cuadrática para encontrar las raíces de y a de ser $t = 0.005755$ y $y = 2.044$. Por lo tanto, estimamos que el misil aterrizará a tierra en 2044 millas

Ejemplo 17. Encuentre la parábola que mejor ajuste los tres puntos $(0,6)$, $(1,0)$ y $(2,0)$.

Solución. La parábola $y = a + bt + ct^2$ debe satisfacer las ecuaciones:
$y(0) = c = 6$
$y(1) = a + b + c = 0 \longrightarrow a + b = -6$
$y(2) = a + 2b + 4c = 0 \longrightarrow a + 2b = -24$
Restando las dos ecuaciones obtenemos: $-b = 18 \longrightarrow b = -18$ y $a = -6 + 18 = 12$.

El sistema $Ax = b$ tiene solución y en este caso la parábola pasa por los tres puntos. Por tanto, la matriz proyección es la matriz indentidad y la matriz A tiene tres columnas que generan $\mathbb{R}^3$ y el error es cero. Así, no es necesario resolver $A^T Ax = b$.



Ejemplo 18. Calcule la parábola que mejor ajusta los cuatro puntos $\{(1,4), (-2,5), (3,-1), (4,1)\}$.

Solución. Podemos resolver el problema en forma directa. La matriz A es dada por:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix} \text{ y } b = \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Luego,

$$A^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \end{bmatrix} \text{ entonces}$$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 6 & 30 \\ 6 & 30 & 84 \\ 30 & 84 & 354 \end{bmatrix}$$

$$(A^TA)^{-1} = \frac{1}{4752}\begin{bmatrix} 3564 & 396 & -396 \\ 396 & 516 & -156 \\ -396 & -156 & 84 \end{bmatrix}$$

La solución $\hat{x}$ es dada por:

$$\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb = \frac{1}{4752}\begin{bmatrix} 3564 & 396 & -396 \\ 396 & 516 & -156 \\ -396 & -156 & 84 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{4752}\begin{bmatrix} 3564 & 396 & -396 \\ 396 & 516 & -156 \\ -396 & -156 & 84 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 9 \\ -5 \\ 31 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.5 \\ -0.81 \\ -0.04 \end{bmatrix}$$

Así, el mejor ajuste cuadrático para los datos está dado por la parábola $y = 3.75 - 0.81t - 0.04t^2$.

1. Las fórmulas $\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$ tiene varias aplicaciones teóricas pero no son eficientes para cálculos numéricos. Pues, si n es grande, entonces el cálculo de $(A^TA)^{-1}$ además de ser inéficas y numéricamente inestable, puede llevar una gran cantidad de errores numéricos. En este caso, es mucho más eficiente calcular las soluciones por medio de eliminación Gaussiana.

2. El desarrollo clásico basado sobre diferenciación parcial no es fácilmente generalizado para cubrir el caso de matrices complejas, pero el método estudiado aquí, se extiende fácilmente para matrices complejas; simplemente reemplazando A^*por A^T.

Mínimos cuadrados y descomposición QR

Si $Ax = b$ es un sistema posiblemente inconsistente, entonces como se discute en la sección anterior, el conjunto de todas las soluciones de mínimos cuadrados es el conjunto de soluciones al sistema de ecuaciones normales $A^TAx = A^Tb$. Pero calcular A^TA generalmente no es recomendable. En primer lugar, es ineficaz y en segundo, puede resultar una pérdida de información significativa, mientras que el enfoque QR no sufre de estas objeciones.

Supongamos que $RangA = n$ donde A es una matriz real mxn. En este caso, existe una solución de mínimos cuadrados única. Sea $A = QR$ la factorización QR entonces las columnas de Q son un conjunto ortonormal y R es triangular superior con elementos no nulos en la diagonal principal, luego $Q'Q = I$ y R es invertible.

Así, $A^TA = (QR)^T = R^TQ^TQR = R^TIR = R^TR$ por tanto las ecuaciones normales pueden ser escritas como $R^TRx = R^TQ^Tb$. Pero R es invertible, entonces R^T también es invertible, luego $Rx = Q^Tb$.

Este es solo un sistema triangular superior que se resuelve con suficiente eficacia madiante sustitución hacia atrás. En otras palabras, la mayor parte del trabajo implicado en la solución del problema de los mínimos cuadrados está en calcular la factorización QR de A.

La solución es $x = R^{-1}Q^Tb$ que es igual a $(A^TA)^{-1}A^Tb$ Con $A = QR$. Así tenemos el siguiente teorema:

Teorema 7. *Sea A una matriz mxn con $RangA = n$ y $A = QR$ la factorización QR de A. Entonces, la solución por mínimos cuadrados de A es dada por la solución del sistema triangular $Rx = Q^Tb$.*

Ejemplo 19. Usa la factorización QR de la matriz A para calcular la solución de mínimos cuadrados del sistema $Ax = b$ donde $A = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & 0 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ y $b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix}$.

Solución. Observa que el sistema $Ax = b$ es inconsistente. Encontremos la factorización QR de la matriz A.

$q_1 = \frac{a_1}{||a_1||} = \frac{(1,1,1)}{\sqrt{3}} = (\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})$ y $v_1 = \sqrt{3}$

$a_2 - < a_2, q_1 > q_1 = (-2, 0, 2) - 0 \cdot q_1 = (-2, 0, 2)$

$q_2 = \frac{(-2,0,2)}{||(,2,0,2)||} = \frac{(-2,0,2)}{\sqrt{8}} = \frac{(-2,0,2)}{2\sqrt{2}} = \frac{(-1,0,1)}{\sqrt{2}}$ y $v_2 = 2\sqrt{2} = \sqrt{8}$

Luego,

$$A = QR = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 2\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

Ahora $R = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 2\sqrt{2} \end{bmatrix}$ entonces $detR = 2\sqrt{6}$ luego,

$R^{-1} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2\sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}$ y $Q^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$

Luego la solución por mínimos cuadrados está dada por $x = R^{-1}Q^Tb$

$$x = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2\sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$x = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2\sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{7}{\sqrt{3}} \\ \frac{3}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} \frac{14\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$ Entonces

$$x = \begin{bmatrix} \frac{7}{3} \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix}$$

Así, $x = \begin{bmatrix} \frac{7}{3} \\ \frac{3}{4} \end{bmatrix}$ es la solución por mínimos cuadrados de $Ax = b$

Ejemplo 20. Use la factorización QR de la matriz A para calcular la solución por mínimos cuadrados del sistema $Ax = b$ obtenido. Encuentre la recta que mejor ajusta los puntos $\{(4, 0), (1, 1), (1, 0)\}$.

Solución. Primero encontremos la descomposición QR de A. En este caso, $a_1 = (1, 1, 1)$ y $a_2 = (4, 1, 1)$, entonces:

$v_1 = ||(1,1,1)|| = \sqrt{1^2+1^2+1^2} = \sqrt{3}$

$q_1 = \frac{(1,1,1)}{\sqrt{3}} = (\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})$

$q_2 = \frac{a_2 - <q_q, a_2> q_1}{v_2}$ donde $v_2 = ||a_2 - <q_q, a_2> q_1||$

$R_{12} =< q_1, a_2 >=< (\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})(4,1,1) >= \frac{4}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{3}} + \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{6}{\sqrt{3}}$

$(4,1,1) - \frac{6}{\sqrt{3}}(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}) = (4,1,1) - (2.2.2) = (4-2, 1-2, 1-2) = (2,-1,-1)$

$||v_2|| = ||(2,-1,-1)|| = \sqrt{2^2+(-1)^2+(-1)^2} = \sqrt{6}$

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

El determinante de $R = \sqrt{18}$ y su inversa está dada por $R^{-1} = \frac{1}{\sqrt{18}} \begin{bmatrix} \sqrt{6} & \frac{-6}{\sqrt{3}} \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix}$, luego

$x = R^{-1}Q^Tb = \frac{1}{\sqrt{18}} \begin{bmatrix} \sqrt{6} & \frac{-6}{\sqrt{3}} \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 2\sqrt{6} & -\sqrt{6} & -\sqrt{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

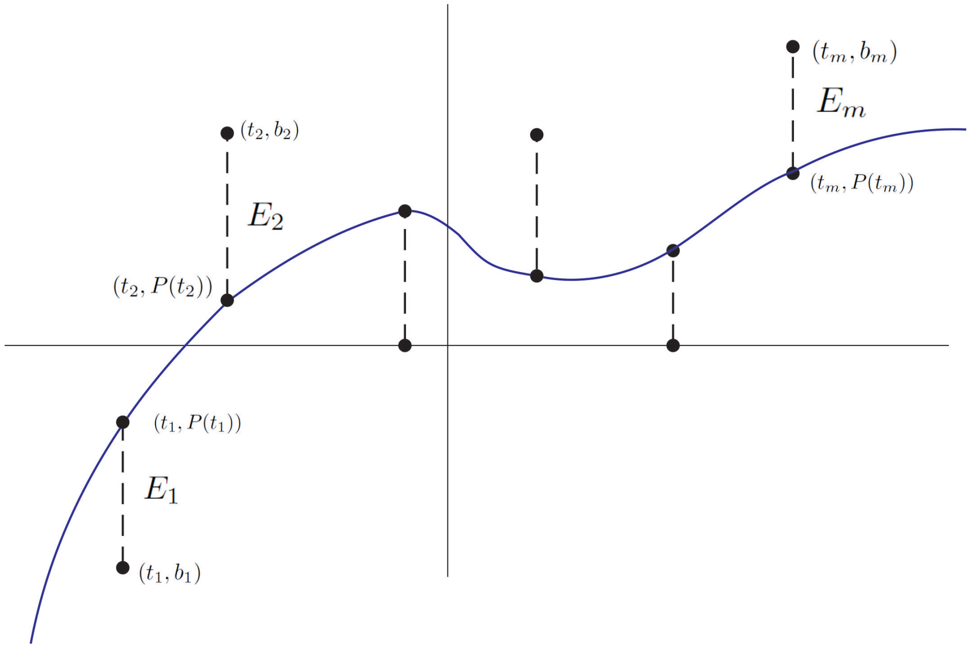
$x = \frac{1}{\sqrt{18}} \begin{bmatrix} \sqrt{6} & \frac{-6}{\sqrt{3}} \\ 0 & \sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{7\sqrt{6}}{\sqrt{3}} \\ -\sqrt{18} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{18}} \begin{bmatrix} \frac{7\sqrt{6}}{\sqrt{3}} \\ -\sqrt{18} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{7}{3} \\ -1 \end{bmatrix}$

Luego la línea recta es $y = \frac{7}{3} - x$

Mejor Aproximación Polinomial

En múltiples problemas de las ciencias biológicas físicas y sociales reulta útil describir la relación entre las variables de los mismos por medio de una expresión matemática. Por ejemplo, se puede representar la relación entre la aceleración debido a la gravedad, el tiempo que un objeto ha caído y la altura a la que estaba mediante la ley física $s = s_o - v_o t - \frac{1}{2}gt^2$. Infelizmente, no es fácil obtener fórmulas como estas y por tanto los científicos tienden a trabajar con grandes cantidades de datos para encontrar relaciones entre las variables de un problema. Una manera común de hacer esto es ajustar un polinomio entre los distintos puntos de datos.

Ejemplo 21. Encuentre un polinomio $p(t) = \alpha_0 + \alpha_1 t + \alpha_2 t^2 + \cdots + \alpha_{n-1}t^{n-1}$ de grado específico que mejor se ajusta en el sentido de mínimos cuadrados y mejor se ajusta a pasar por un conjunto de datos $D = \{(t_1 b_1,), (t_2, b_2), \ldots, (t_m, b_m)\}$ donde los t_i son números reales distintos y $n \leq m$.



Solución. El objetivo es minimizar la suma de los cuadrados: $\sum_{i=1}^{m} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{m} (p(t_i) - b_i)^2 = (Ax-b)^T(Ax-b)$ donde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \cdots & t_1^{n-1} \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \cdots & t_2^{n-1} \\ 1 & t_3 & t_3^2 & \cdots & t_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & t_m & t_m^2 & \cdots & t_m^{n-1} \end{bmatrix}, \; x = \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \end{bmatrix} \text{ y } b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Así buscamos el valor de x que minimiza la expresión $||Ax - b||$ el cual se obtiene de una solución por mínimos cuadrados de $Ax = b$. Note que A_{mxn} es la matriz de Vendermonde el cual tiene $Rang A = n \leq m$ ya que los t_i son todos distintos. Por tanto, $Ax = b$ tiene una única solución por mínimos cuadrados dado por $x = (A^TA)^{-1}A^Tb$.

Ejemplo 22. Una persona lanza una pelota al aire en dirección hacia abajo. La altura que alcanza está dada por $s(t) = s_0 + v_o t + \frac{1}{2}gt^2$. Se toman las siguientes mediciones:

Tiempo transcurrido	Altura
0	200
1	195
2	180
4	120
6	25

Utiliza mínimos cuadrados para estimar g y la velocidad inicial con que se lanza la pelota.

Solución. Los coeficientes del término t^2 serán si las mediciones son buenas, una aproximación razonable del número $\frac{1}{2}g$. Así debemos encontrar el polinomio de grado dos que mejor ajusta estos datos.

Para ello, Sea $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 4 & 16 \\ 1 & 6 & 136 \end{bmatrix}$ y $A^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 4 & 6 \\ 0 & 1 & 4 & 16 & 36 \end{bmatrix}$ y $b = \begin{bmatrix} 200 \\ 195 \\ 180 \\ 120 \\ 25 \end{bmatrix}$

$A^TA = \begin{bmatrix} 5 & 13 & 57 \\ 13 & 57 & 289 \\ 57 & 289 & 1569 \end{bmatrix}$ $A^Tb = \begin{bmatrix} 720 \\ 1185 \\ 3735 \end{bmatrix}$ Así tenemos que:

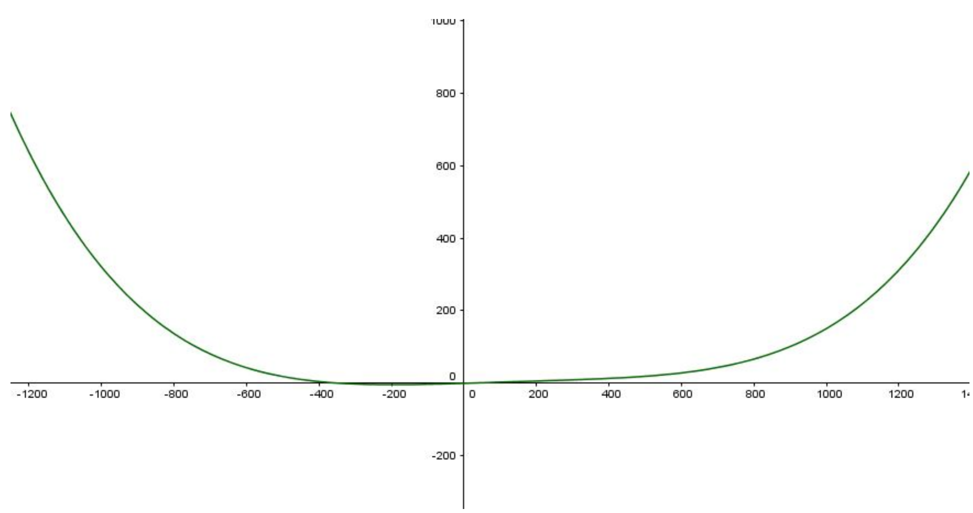
$\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb = \frac{1}{7604} \begin{bmatrix} 5912 & -3924 & 508 \\ -3924 & 4596 & -704 \\ 508 & -704 & 116 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 720 \\ 1185 \\ 3735 \end{bmatrix}$ Así

$\hat{x} = \begin{bmatrix} 200.44 \\ .\frac{-8460}{7504} \\ \frac{-35220}{7504} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 200.44 \\ -1.13 \\ -4.96 \end{bmatrix}$

Así el polinomio $s(t) = 200.44 - 1.13t - 4.69t^2$ y por tanto $\frac{1}{2}g = 4.69 \longrightarrow g = 9.38$ y $v_0 = 1.13$.

Para obtener una aproximación más exacta de g será necesario obtener observaciones más precisas. En el trabajo práctico las observaciones b_i son raramente exactas debido a errores pequeños derivados de mediciones imprecisas o de simplificar suposiciones. Por esta razón, es la tendencia de las observaciones que debe ser ajustada y no las observaciones mismas, por esto, es mejor utilizar mínimos cuadrados para obtener un ajuste de los datos y no usar un polinomio exacto como el de Lagrange que si bien nos da un ajuste exacto, no es generalmente útil para hacer estimaciones con respecto a la tendencia de las observaciones. Hay otro polinomio que también ayudacomo el de Hermile en el cual se pueden obtener información específica. En cada punto de datos pero no es tan bueno como los mínimos cuadrados.

Ejemplo 23. Si en el problema del misil en lugar de mínimos cuadrados utilizamos interpolación de Lagrange de grado 4 obtenemos $\mathcal{L}(t) = \frac{11}{375}t + \frac{17}{750000}t^2 - \frac{1}{8750000}t^3 + \frac{1}{4687500000}t^4$. Puedes verificar que $\mathcal{L}(t_i) = b_i$ para cada observación. En la figura se muestra que $\mathcal{L}(t)$ tiene solo una raíz real no negativa y es $t = 0$ y por tanto es inútil predecir dónde aterrizará el misil. Esto es característico de la interpolación de Lagrange.



Mínimos cuadrados para calcular la proyección ortogonal

El método de los mínimos cuadrados puede ser utilizado para calcular la proyección ortogonal de un vector b de $\mathbb{R}^m$ sobre un subespacio generado por un conjunto de vectores $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$.

Considere A la matriz cuyas columnas son los vectores $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$. Así, a medida que x varía en $\mathbb{R}^n$, el vector Ax varía en el espacio columna de A y queremos un vector $\hat{x}$ de $\mathbb{R}^n$ tal que $A\hat{x}$ es más próximo al vector b.

Como sabemos el vector $b - A\hat{x}$ es perpendicular al subespacio generado por $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ y por tante hace un ángulo recto con todos los vectores $v, v_2, \dots, v_n$ lo que nos da las $n - ecuaciones$.

$v_1^T(b - A\hat{x}) = 0$

$v_2^T(b - A\hat{x}) = 0$

$\vdots$
$v_1^T(b - A\hat{x}) = 0$

$$\text{Entonces, } \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{bmatrix} (b - A\hat{x}) = 0$$

La matriz con filas v_i^T es A^T luego obtenemos $A^T(b - A\hat{x}) = 0 \longrightarrow A^Tb = A^Tx$ y si A tiene rango máximo entonces $\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$ y por tanto, la proyección de b sobre el subespacio generado por $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ es:

$P_b = A \cdot \hat{x} = A(A^TA)^{-1}A^Tb$ y así la matriz proyección es $P = A(A^TA)^{-1}A^Tb$.

Observación 12. 1. En el caso particular que $n = 1$ entonces $w = span\{v_1\}$ y la matriz A es un vector columna de tamaño $mx1$ y A^T es un vector fila de tamaño $1xm$. Luego, $A^TA = v_1^Tv_1$ es un número real y su inverso es simplemente $\frac{1}{v_1^Tv_1}$. Así la proyección ortogonal de b sobre w es dada en este caso por: $P_w(b) = A(A^TA)^{-1}A^Tb = \frac{v_1(v_1^Tb)}{v_1^Tv_1} = \frac{v_1v_1^T}{v_1^Tv_1} \cdot b$.
2. Así en lugar de aplicar el método de Grand-Schmidt para convertir $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ en una base ortonormal de w y luego aplicar la fórmula $P_w(b) = c_1v_1 + c_2v_2 + \dots + c_nv_n$ con $c_i =< b_i, v_i >$- Se puede tomar una matriz A cuyas columnas son los vectores $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ y calcular $(A^TA)^{-1}$ y luego a la izquierda por A y a la derecha por A^T.

Ejemplo 24. a. Calcule la parábola que mejor ajusta los puntos $\{(-2,0), (-1,0), (0,1), (1,0), (2,0)\}$.
b. Utiliza a. para calcular la proyección del vector $b = (0,0,1,0,0)$ sobre $w = span\{(1,1,1,1,1), (-2,-1,0,1,2$

Solución. a. La parábola la obtenemos aplicando mínimos cuadrados a la matriz:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ y } A^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}$$

Entonces $A^TA = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 10 \\ 0 & 10 & 0 \\ 10 & 0 & 34 \end{bmatrix}$, así la solución es: $\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$.

El lector puede verificar que $\hat{x} = \begin{bmatrix} \frac{34}{70} \\ 0 \\ \frac{-10}{70} \end{bmatrix}$ es la única solución, lo que implica que la recta $f(t) = \frac{34}{20}t - \frac{1}{7}t^2 = \frac{17}{35} - \frac{1}{7}t^2$ es la mejor parábola que ajusta los puntos.

b. La proyección ortogonal de b sobre w es $P_w(b) = A\hat{x} = A\begin{bmatrix} \frac{17}{35} \\ 0 \\ \frac{-1}{7} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{17}{35} \\ 0 \\ \frac{-1}{7} \end{bmatrix}$ Así:

$P_w(b) = \begin{bmatrix} -3/35 \\ 12/35 \\ 17/35 \\ 12/35 \\ -3/35 \end{bmatrix}$

Ejemplo 25. a. Calcule la proyección ortogonal del vector $b = (3,4,4)$ sobre el subespacio $W = span\{(2,2,1)\}$

b. Encuentre la matriz proyección P sobre el plano $W = span\{(2,2,1),(1,0,0)\}$

Solución. Sabemos que la proyección sobre un espacio de dimensión 1 es dado por: $w = span\{v\}$. Así tenemos que:

$P = \frac{v^Tb}{v^Tv} \cdot v = \frac{<(2,2,1),(3,4,4)>}{<(2,2,1),(2,2,1)>} \cdot (3,4,4)$

$P = \frac{6+8+44}{4+4+1} \cdot (3,4,4) = \frac{18}{9}(3,4,4) = 2(3,4,4) = (6,8,8)$

b. Sea $A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ por definición, sabemos que la matriz proyección es dada por $P = A(A^TA)^{-1}A^T$.
Ahora:

$A^T = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ y $A^TA = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$ y

$(A^TA)^{-1} = \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 9 \end{bmatrix}$ y la matriz proyección es:

$P = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\frac{1}{5}\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 9 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

$P = \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 5 & -4 & -2 \end{bmatrix} = \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \end{bmatrix}$

Luego $P = \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \end{bmatrix}$ es la matrz de proyección sobre el plano W.

Ejemplo 26. Calcule la proyección ortogonal del vector $b = (-3, -2, 8, 9)$ sobre el subespacio W generado por los vectores $u_1 = (3, 1, 0, 1); u_2 = (1, 2, 1, 1,); u_3 = (-1, 0, 2, -1)$.

Solución. Este problema lo podemos resolver usando el proceso de Grand-Schmidt a los vectores $\{u_1, u_2, u_3\}$ para obtener una base ortonormal $\{v_1, v_2, v_3\}$ de W y luego aplicar la fórmula $P_W(b) = c_1v_1 + c_2v_2 + c_3v_3$ donde $c_i =< b.v_i >$ para $i = 1, 2, 3$.

Sin embargo, usaremos el método de los mínimos cuadrados a la matriz

$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$ y la proyección ortogonal es $P_W(b) = A\hat{x}$ donde $\hat{x} = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$ es solución del sistema normal $(A^TA)\hat{x} = A^Tb$. Ahora:

$$A^TA = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 2 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 & 6 & -4 \\ 6 & 7 & 0 \\ -4 & 0 & 6 \end{bmatrix}$$

$A^Tb = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 2 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -3 \\ -3 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 8 \\ 10 \end{bmatrix}$ y el sistema normal es:

$$\begin{bmatrix} 11 & 6 & -4 \\ 6 & 7 & 0 \\ -4 & 0 & 6 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 8 \\ 10 \end{bmatrix}.$$

Dejamos al lector la tarea de encontrar las soluciones del sistema que son dadas por:

$x_1 = -1; x_2 = 2; x_3 = 1$ y $\hat{x} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$. De modo que:

$$P_Wb = A\hat{x} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 3 \\ 4 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 11 & 6 & -4 & | & -3 \\ 6 & 7 & 0 & | & 8 \\ -4 & 0 & 6 & | & 10 \end{bmatrix} L_1 \longleftrightarrow L_3 \begin{bmatrix} -4 & 0 & 6 & | & 10 \\ 6 & 7 & 0 & | & 8 \\ 11 & 6 & -4 & | & -3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -4 & 0 & 6 & | & 10 \\ 6 & 7 & 0 & | & 8 \\ 11 & 6 & -4 & | & -3 \end{bmatrix} \frac{-1}{4}L_1 \longleftrightarrow L_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{-3}{2} & | & \frac{-5}{2} \\ 6 & 7 & 0 & | & 8 \\ 11 & 6 & -4 & | & -3 \end{bmatrix}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & \frac{-3}{2} & \frac{-5}{2} \\ 6 & 7 & 0 & 8 \\ 11 & 6 & -4 & -3 \end{array}\right] \begin{array}{c} -6L_1+L_2 \longrightarrow L_2 \\ -11L_1+L_3 \longrightarrow L_3 \end{array} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & \frac{-3}{2} & \frac{-5}{2} \\ 0 & 7 & 9 & \frac{15}{8} \\ 0 & 6 & \frac{25}{2} & \frac{49}{2} \end{array}\right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & \frac{-3}{2} & \frac{-5}{2} \\ 0 & 7 & 9 & \frac{15}{8} \\ 0 & 6 & \frac{25}{2} & \frac{49}{2} \end{array}\right] \tfrac{1}{7}L_2 \longleftrightarrow L_2 \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & \frac{-3}{2} & \frac{-5}{2} \\ 0 & 1 & \frac{9}{7} & \frac{23}{7} \\ 0 & 6 & \frac{25}{2} & \frac{49}{2} \end{array}\right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & \frac{-3}{2} & \frac{-5}{2} \\ 0 & 1 & \frac{9}{7} & \frac{23}{7} \\ 0 & 6 & \frac{25}{2} & \frac{49}{2} \end{array}\right] -6L_2+L_3 \longrightarrow L_3 \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & \frac{-3}{2} & \frac{-5}{2} \\ 0 & 1 & \frac{9}{7} & \frac{23}{7} \\ 0 & 0 & \frac{67}{14} & \frac{67}{14} \end{array}\right]$$

Luego obtenemos:

$\frac{67}{14}x_3 = \frac{67}{14} \longrightarrow x_3 = 1$, además,

$x_2 + \frac{9}{7}x_3 = \frac{23}{7} \longrightarrow x_2 + \frac{9}{7} = \frac{23}{7} \longrightarrow x_2 = \frac{23-9}{7} = \frac{14}{7} = 2$ y finalmente,

$x_1 - \frac{3}{2}x_3 = \frac{-5}{2} \longrightarrow x_1 - \frac{3}{2} = \frac{-5}{2} \longrightarrow x_1 = \frac{-2}{2} = -1$

El lector puede observar que en general la matriz A dada en $\hat{x} = (A^TA)^{-1}A^Tb$ no es invertible y por tanto no se puede dividir el término $(A^TA)^{-1}$ en A^{-1} veces $(A^T)^{-1}$ pues de ser así obtenemos $\hat{x} = A^{-1}(A^T)^{-1}A^Tb = A^{-1}b$ lo que sabíamos pues en este caso, el sistema $Ax = b$ tiene solución y no es necesario pasar a ecuaciones normales.

La matriz A es rectangular y no tiene una matriz inversa. No podemos dividir $(A^TA)^{-1}$ en A^{-1} veces $(A^T)^{-1}$ porque no hay A^{-1}. Cuando A tiene columnas independientes A^TA es invertible.

Ejemplo 27. Si A es mxn entonces A^T es mxn y por tanto A^TA es cuadrada nxn y es simétrica. Además A^TA es invertible siempre que A tenga columnas linealmente independientes. Por ejemplo,

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 8 \end{bmatrix} \text{ donde } A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ y } A^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \end{bmatrix} \text{ y } A^T \text{ es invertible.}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 4 & 9 \end{bmatrix} \text{ donde } A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ y } A^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \text{ y } A^T \text{ es invertible.}$$

Demostración del teorema de mínimos cuadrados usando cálculo

Como ya hemos visto los sistemas de inconsistentes de ecuaciones lineales son uy importantes en las aplicaciones físicas y en muchas situaciones comunes de algún problema físico lleva a un sistema $Ax = b$ que debería ser consistente por la teoría pero no lo es y en muchos casos es por los errores en las observaciones que dan las entradas de A y de b. Por tal razón, en mínimos cuadrados buscamos un valor de x que esté tan cerca como posible de ser solución en el sentido que minimiza el error $\varepsilon^2 = ||Ax - b||^2$.

Como es un problema de minimización tiene una solución desde el punto de vista del calculo y en esta sección demostraremos que la solución por medio del cálculo es la misma que obtuvimos con ayuda de la proyección ortogonal que es una solucion un poco más geométrica.

Teorema 8. *Sea A una matriz mxn y $b \in \mathbb{R}^m$ el problema de mínimos cuadrados consiste en encontrar un vector $\hat{x}$ que minimiza la suma de los cuadrados de los errores, esto es, minimiza $||Ax - b||^2$. El conjunto de soluciones por mínimos cuadrados es exactamente el conjunto de soluciones de las ecuaciones normales $A^T Ax = A^T b$.*

Demostración. Demostremos que si x minimiza la ecuación $E = ||Ax-b||^2 = (Ax-b)^T(Ax-b)$ entonces x debe satisfacer la ecuación normal $A^T Ax = A^T b$. La función a minimizar es:

$$E(x) = (Ax - b)^T(Ax - b) = \left[(Ax)^T - (b)^T\right][Ax - b]$$

$$E(x) = (Ax)^T Ax - (Ax)^T b - b^T Ax + b^T b$$

$$E(x) = x^T A^T Ax - x^T A^T b - b^T Ax + b^T b$$

Pero $x^T A^T b$ es un número real que es igual al número real $b^T Ax$ y por tanto debemos minimizar la función $E(x_1, x_2, \ldots x_n) = x^T A^T Ax - 2x^T A^T b + b^T b$. Podemos ahora derivar parcialmente cada una de estas matrices con respecto a las variables x_i y aplicando las reglas del producto de derivación obtenemos:

$\frac{\partial E}{\partial x_i} = \frac{\partial x^T}{\partial x_i} A^T Ax + x^T A^T A \frac{\partial x}{\partial x_i} - 2\frac{\partial x^T}{\partial x_i} A^T b.$

Como $\frac{\partial x}{\partial x_i} = e_i$ (el i-ésimo vector unitario) tenemos:

$\frac{\partial x}{\partial x_i} = e_i^T A^T Ax + x^T A^T Ae_i - 2e_i^T A^T b = 2e_i^T A^T Ax - 2e_i^T A^T b$ ya que los productos

$e_i^T A^T Ax = (Ae_i)^T Ax = (A^{(i)})^T Ax$ y $x^T A^T e_i = (Ax)^T Ae_i = (Ax)^T A^{(i)}$ son iguales.

Ahora, $e_i^T A^T = (A^T)_i$y como $\frac{\partial E}{\partial x_i} = 0$ entonces obtenemos las $n - ecuaciones$

$2e_i^T A^T Ax = 2e_i^T A^T b$

$(e_i^T A^T)Ax = (e_i^T A^T)b$

$(A^T)_i Ax = (A^T)_i b$ para $i = 1, 2, \ldots, n$

y estas ecuaciones pueden ser escritas en forma matricial como $A^T Ax = A^T b$, así el mínimo valor para E debe ocurrir (si existe) en la solución de esta ecuación. Falta demostrar que E alcanza su valor mínimo en cada solución de $A^T Ax = A^T b$.

Supongamos que z es una solución de las ecuaciones normales, entonces:

$z = z^T A^T Az - 2z^T A^T b + b^T b$. Como $A^T Az = A^T b$ entonces,

$Ez = z^T A^T Az - 2z^T A^T b + b^T b = b^T b - z^T A^T b$ luego, para cualquier $y \in \mathbb{R}^n$ defina $u = y - z$, así, $y = z + u$ y observe que:

$E(y) = E(z + u) = b^T b - 2(z + u)^T A^T b + (z + u)^T A^T A(z + u)$

$E(y) = b^T b - 2z^T A^T b - 2u^T A^T b + (z^T + u^T)(A^T Az + A^T Au)$

$E(y) = b^T b - 2z^T A^T b - 2u^T A^T b + z^T A^T Az + z^T A^T Au + u^T A^T AAz + u^T A^T Au$

$E(y) = b^T b - 2zA^T b - 2u^T A^T b + z^T A^T Au + u^T A^T b + (Au)^T (Au)$

$E(y) = E(z) - u^T A^T b + z^T A^T Au + (Au)^T (Au)$

pero $A^T b = A^T Az \longrightarrow E(y) = E(z) - u^T A^T Az + z^T A^T Au + (Au)^T (Au)$

$E(y) = E(z) - v^T v$, donde $v = Au$

Finalmente, como $v^T v \geq 0$ entonces $E(y) = E(z) + v^T v \geq E(z)$ para todo $y \in \mathbb{R}^{nx1}$. Luego E alcanza su valor mínimo en cada solución de las ecuaciones normales lo que completa la demostración.

$\square$

Ejemplo 28. Calcule la ecuación de la recta $x = e$ que mejor aproxima los puntos $(1, 7), (1, 8), (1, 11)$ utilizando el método de cálculo y el método geométrico.

Solución. Por medio del cálculo debemos minimizar la función:

$f(x) = (x - 7)^2 + (x - 8)^2 + (x - 12)^2$, luego,

$\frac{\partial f}{\partial x} = 2(x - 7) + 2(x - 8) + 2(x - 12) = 3x - 27 = 0 \longrightarrow x = \frac{27}{9} = 3$

b. Por geometría, la matriz $A = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ y el vector $b = \begin{bmatrix} 7 \\ 8 \\ 12 \end{bmatrix}$ debemos resolver $A^T Ax = A^T b$. De hecho tenemos $A^T = (1, 1, 1)$ y $A^T A = 3$ y $A^T b = 7 + 8 + 12 = 27$, entonces, $3x = 27 \longrightarrow x = 9$

Ejemplo 29. Calcule la ecuación de la recta que pasa por el orgien $y = mx$ y que mejor aproxima los puntos de $S = \{(5, 1), (7, 2), (8, 2), (10, 2), (12, 3)\}$ usando primero el método de cálculo y luego el método geométrico.

Solución. a. Debemos minimizar los errores al cuadrado. Para ello, note que:

$y(5) = 5m = 1$; $y(7) = 7m = 2$; $y(8) = 8m = 2$; $y(10) = 10m = 2$; $y(12) = 12m = 3$

$E(m) = (5m - 1)^2 + (7m - 2)^2 + (8m - 2)^2 + (10m - 2)^2 + (12m - 3)^2$

$\frac{\partial E}{\partial m} = 0 \longrightarrow \frac{\partial E}{\partial m} = 2(5m - 1) + 2(7m - 2) + 2(8m - 2) + 2(10m - 2) + 2(12m - 3) = 0$

$25m - 5 + 49m - 14 + 64m - 16 + 100m - 20 + 144m - 36 = 0$

$382m - 91 = 0 \longrightarrow m = \frac{91}{382} = 0,23.$

b. Por el método geométrico tenemos.

$$A = \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \\ 8 \\ 10 \\ 12 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 8 \end{bmatrix} \longrightarrow A^T = \begin{bmatrix} 5 & 7 & 8 & 10 & 12 \end{bmatrix}, \text{ así tenemos}$$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 5 & 7 & 8 & 10 & 12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \\ 8 \\ 10 \\ 12 \end{bmatrix} = 25 + 49 + 64 + 100 + 133 = 382$$

$$A^T b = \begin{bmatrix} 5 & 7 & 8 & 10 & 12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = 5 + 14 + 16 + 20 + 36 = 91$$

$$A^T Ax = A^T b \longrightarrow 382\hat{x} = 91 \longrightarrow \hat{x} = \frac{91}{382} = 0,23$$

Finalizamos este capítulo con algo de historia de los mínimos cuadrados.

Mientras observaba una región en la constelación de Tauro el 1 de enero de 1801, Giuseppe Piazzi, astrónomo y director del observatorio de Palermo observó una pequeña “estrella” que nunca había visto antes. Mientras Piazzi y otros continuaban observando esta nueva “estrella” que en realidad era un asteroide. Se dieron cuenta de que se había descubierto un nuevo “planeta”, sin embargo, su nuevo “planeta” desapareció completamente en el otoño de 1801.

Los astrónomos conocidos de la época se unieron a la búsqueda de reubicar el “planeta perdido” pero todos los esfuerzos fuerno en vano.

En septiembre de 1801 Carl F. Gauss decidió enfrentarse al desafío de encontrar este “planeta perdido”. Gauss permitió la posibilidad de una órbita elíptica en lugar de obligarla a ser circular que era una suposición de los otros y procedió para desarrollar el método de mínimos cuadrados. En diciembre, la tarea se completó y Gauss informó a la comunidad científica no solo donde se encontraba el planeta perdido, sino que también predijo su posición en los tiempos futuros. Observaron y era exactamente donde Gauss había predicho que sería.

El asteroide se llamó Ceres y la contribución de Gauss fue reconocida por el nombramiento de otro asteroide menor Gaussia. Esta extraordinaria hazaña de localizar un diminuto y lejano cuerpo celeste a partir de datos aparentemente insuficientes asombró a la comunidad científica. Además, Gauss se negó a revelar sus métodos y hubo quienes incluso lo acosaron de brujería.

Estos acontecimientos condujeron directamente a la fama de Gauss en toda la Comunidad Europea y contribuyeron a establecer su reputación como un genio matemático y científico del más alto nivel.