

# Mínimos Cuadrados: Complemento

JP

## Contents

1	Introducción: ¿Cómo resolver un sistema de ecuaciones lineales incompatible? . . . . .	1
2	Repaso de conceptos básicos y un concepto fundamental . . . . .	1
3	El concepto de solución aproximada . . . . .	2
4	¿Cómo hallar la solución aproximada? . . . . .	3
5	Aplicación: Mínimos Cuadrados . . . . .	4
6	Observaciones . . . . .	7
7	Ejemplos . . . . .	7

## 1 Introducción: ¿Cómo resolver un sistema de ecuaciones lineales incompatible?

Muchos de los problemas que debe resolver un ingeniero implican la resolución de sistemas de ecuaciones lineales.

Es muy frecuente que el sistema a resolver sea un sistema incompatible, lo que plantea una tarea aparentemente imposible: ¿cómo hallar una solución a un sistema que no la tiene?

Para ello repasemos brevemente algunas cuestiones básicas.

## 2 Repaso de conceptos básicos y un concepto fundamental

Supongamos que tenemos un sistema ( $S$ ) de  $m$  ecuaciones con  $n$  incógnitas:

$$(S) \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

Si llamamos  $A$  a la matriz real  $m \times n$  formada por los coeficientes  $a_{ij}$ ,  $i = 1 \dots m$ ,  $j = 1 \dots n$ ,  $X$  a la matriz  $n \times 1$  formada por las incógnitas  $x_j$ ,  $j = 1 \dots n$  y  $B$  a la matriz  $m \times 1$  formada por los términos independientes  $b_i$ ,  $i = 1 \dots m$ , podemos escribir el sistema ( $S$ ) como  $A.X = B$ .

Llamemos  $A_1, A_2, \dots, A_n$  a las columnas de la matriz  $A$  (cada columna podemos pensarla como un vector de  $\mathbb{R}^m$ , al igual que  $B \in \mathbb{R}^m$ ).

Pensándolo en términos vectoriales, el sistema ( $S$ ) toma la forma

$$x_1A_1 + x_2A_2 + \cdots + x_nA_n = B$$

Esta forma de mirar las cosas nos lleva a un concepto fundamental: *Que el sistema sea compatible equivale a que el vector  $B$  de términos independientes sea combinación lineal de las columnas de  $A$ , y lo que llamamos solución del sistema son los coeficientes  $X$  con los que podemos expresar a  $B$  como combinación lineal de  $\{A_1, A_2, \dots, A_n\}$ ,  $B$  pertenece al subespacio generado por las columnas de  $A$ .*

Si las columnas de  $A$  forman un conjunto linealmente independiente en  $\mathbb{R}^m$  los coeficientes  $x_1, x_2, \dots, x_n$  serán únicos y el sistema será compatible determinado.

Si las columnas de  $A$  forman un conjunto linealmente dependiente existirán infinitas maneras de construir a  $B$  a partir de las columnas de  $A$ , tendremos muchos juegos de coeficientes  $X$  y diremos que el sistema es compatible indeterminado.

Por último, *si el sistema es incompatible, esto significa que el término independiente  $B$  no puede obtenerse como combinación lineal de las columnas de  $A$ , esto es,  $B$  “no vive” en el subespacio de  $\mathbb{R}^m$  generado por  $A_1, A_2, \dots, A_n$ .*

Con esto en mente volvamos a nuestro problema original: encontrar algo que podamos llamar “solución” a un sistema  $A.X = B$  que es incompatible.

### 3 El concepto de solución aproximada

Recordemos que en los espacios vectoriales  $(\mathbb{R}^k, \mathbb{R}, +, \cdot)$  puede definirse un producto interno apoyándose en el producto de matrices:  $\langle X, Y \rangle = X^t \cdot Y$ , donde  $X^t$  es la matriz-fila  $1 \times k$  e  $Y$  es la matriz-columna  $k \times 1$ .

Esto es,

$$\langle X, Y \rangle = (x_1, x_2, \dots, x_k) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_k \end{pmatrix} = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_k y_k = \sum_{i=1}^k x_i y_i$$

Este producto interno no es otro que el producto interno habitual en este tipo de espacios.

La norma inducida por este producto interno es la norma euclídea,

$$\|X\| = \sqrt{\langle X, X \rangle} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_k^2}$$

La distancia entre  $X$  e  $Y$  es  $\|X - Y\|$ .

Si tenemos un sistema  $A.X = B$  incompatible, con  $A_{m \times n}$ ,  $X_{n \times 1}$ ,  $B_{m \times 1}$ , llamemos  $S = [A_1, \dots, A_n]$  al subespacio de  $\mathbb{R}^m$  generado por las columnas de  $A$ .

Ya hemos visto que lo que está sucediendo es que  $B \notin S$ .

¿No será posible “perturbar” al término independiente  $B$ , cambiarlo por un  $B'$  que se le parezca mucho y que torne al sistema  $A.X = B'$  compatible?.

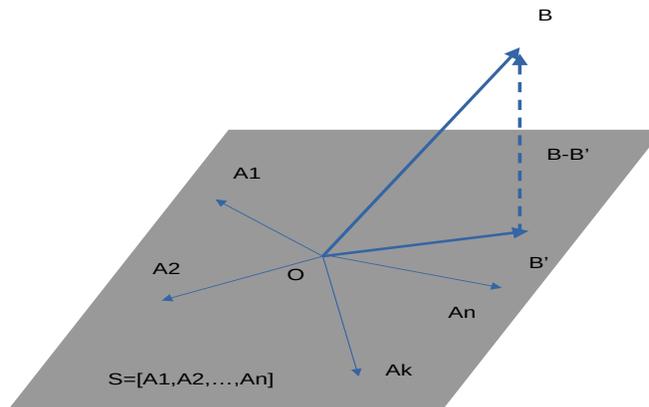
Esto es, la idea es cambiar el vector de términos independientes  $B$  por otro  $B' \in S$  (con esto garantizamos que el sistema  $A.X = B'$  sea compatible), pero como además buscamos que la solución  $X$  refleje lo mejor posible al problema original, es claro que mientras más se parezca  $B'$  al  $B$  original, mejor será.

Entonces la idea es buscar  $B' \in S : \|B - B'\|$  sea mínima.

Si lo logramos, la solución  $X$  del sistema  $A.X = B'$  será lo que llamamos ***solución aproximada***.

Es claro que de entre todos los vectores  $B' \in S$  el que minimiza  $\|B - B'\|$  es  $B' = P_S(B)$ , la proyección ortogonal de  $B$  sobre  $S$ .

La figura (1) ilustra el punto.



..

Fig. 1: Proyección ortogonal de  $B$  sobre el subespacio generado por las columnas de  $A$

#### 4 ¿Cómo hallar la solución aproximada?

Tenemos el sistema de ecuaciones, esto es, conocemos tanto  $A$  como  $B$ , lo que buscamos es una solución  $X$  al sistema  $A.X = B'$ .

Por tanto debemos hallar  $X$  y  $B'$ .

Sabemos que  $B' = P_S(B)$ , o lo que es lo mismo, el único vector de  $S$  tal que  $B - B'$  es ortogonal a  $S$ .

Recordemos que para que un vector sea ortogonal a un subespacio alcanza con que lo sea a una base (o un generador) del mismo.

Imponiendo que  $(B - B') \perp A_i, \forall i = 1, \dots, n$  podremos encontrar el  $B'$  que buscamos.

Recordemos que el que dos vectores sean ortogonales equivale a que su producto interno sea cero, por lo que  $B'$  deberá ser tal que  $\langle (B - B'), A_i \rangle = 0 \forall i = 1 \dots n$ .

Recordemos que las columnas de  $A$  son las filas de  $A^t$ , y que ser ortogonal a todas las filas de  $A^t$  equivale a estar en el núcleo de  $A^t$ .

Por tanto podemos replantear el problema como: Dados  $A$  y  $B$ , buscamos  $B'$  tal que

$$A^t \cdot (B - B') = O \quad (1)$$

Como  $B' \in S$ , sabemos que existe  $X \in \mathbb{R}^n$  tal que  $A \cdot X = B'$ , substituyendo  $B'$  por  $A \cdot X$  en la ecuación (1) obtenemos

$$A^t \cdot (B - A \cdot X) = O \quad (2)$$

Distributiva mediante, llegamos a

$$A^t \cdot B - A^t \cdot A \cdot X = O \quad (3)$$

Despejando, llegamos a

$$\underbrace{(A^t \cdot A)}_M \cdot X = A^t \cdot B \quad (4)$$

La ecuación (4) se conoce como **ecuación normal**.

La solución aproximada  $X$  es entonces la solución del sistema **de  $n$  ecuaciones y  $n$  incógnitas**  $M \cdot X = A^t \cdot B$ .

## 5 Aplicación: Mínimos Cuadrados

Supongamos que tenemos un conjunto de datos (provenientes de medir algo) del tipo  $\{(t_1, y_1), (t_2, y_2), \dots, (t_m, y_m)\}$  donde  $y_k$  es el valor que medimos en  $t_k$  ( $t_k$  puede representar tiempo u otra variable).

Habitualmente se dice que  $t$  es la variable independiente o variable explicativa, mientras que  $y$  es la variable dependiente o variable de respuesta.

La figura (2) muestra un conjunto de 601 datos.

Supongamos que tenemos alguna idea del mecanismo causal, de la relación que vincula la variable explicativa con la de respuesta y que dicho mecanismo puede expresarse como una función  $y = f(t)$ .

Idealmente (si el modelo fuese el correcto y no hubieran errores de medición), uno esperaría que  $f(t_k) = y_k, k = 1, \dots, m$ .

Esto rara vez (por no decir nunca) sucede, lo que tenemos siempre es que  $f(t_k) \approx y_k$ .

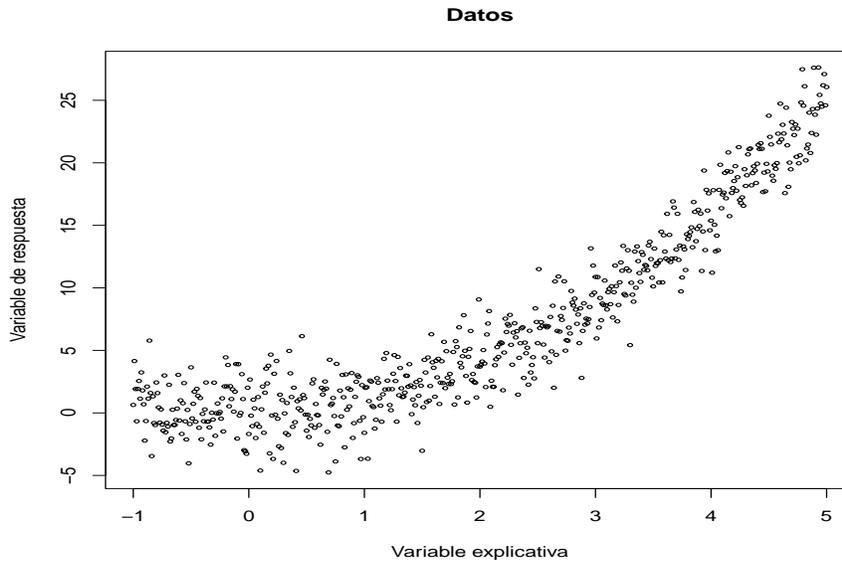


Fig. 2: Conjunto de 601 datos

En palabras, Observado=modelo+error, en lenguaje matemático,  $y_k = f(t_k) + \varepsilon_k$ , donde  $\varepsilon_k$  resume tanto los errores de medición como las posibles variables explicativas no tomadas en cuenta o un modelo  $f$  mal elegido.

Supondremos que el error  $\varepsilon$  es una variable aleatoria cuya distribución de probabilidad es conocida y que los errores de medición son independientes entre sí.

Llamemos  $Y$  al vector  $Y = (y_1, \dots, y_m)$ ,  $T = (t_1, \dots, t_m)$ ,  $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m)$ ,  $f(T) = (f(t_1), \dots, f(t_m))$ .

Entonces tenemos  $Y = f(T) + \varepsilon$ .

Habitualmente el modelo, la función  $f$  con la que pretendemos explicar los datos, se construye apelando a unas pocas funciones que la experiencia ha mostrado útiles: polinomios, exponenciales, logaritmos, trigonométricas.

Llamemos  $\phi = \{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$  a la familia de funciones que utilizaremos para armar nuestra  $f$  y convengamos que nos limitaremos a aquellas  $f$  que sean combinación lineal de  $\varphi_1, \dots, \varphi_n$ .

Esto es, los modelos serán del tipo  $f(t) = x_1\varphi_1(t) + x_2\varphi_2(t) + \dots + x_n\varphi_n(t)$ .

Por ejemplo, si pretendemos explicar un set de datos usando un modelo  $f(t) = a + bt + ct^2 + d\cos(t)$ , tenemos que  $\phi = \{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4\}$  donde  $\varphi_1(t) = 1 \forall t$ ,  $\varphi_2(t) = t$ ,  $\varphi_3(t) = t^2$  y  $\varphi_4(t) = \cos(t)$ , los coeficientes son  $a, b, c, d$ .

Notemos que como la familia  $\phi$  está fija, hallar una  $f$  concreta equivale a hallar los coeficientes  $(x_1, \dots, x_n)$  necesarios para fabricarla (o hallar  $a, b, c, d$  en el ejemplo).

De todas las posibles  $f$  que podemos obtener como combinación lineal de

las funciones en  $\phi$ , nos gustaría hallar la “mejor”, es decir, aquella  $f$  tal que  $\|Y - f(T)\|$  sea mínima.

Esto es, que para cada valor  $t_i$ ,  $i = 1, \dots, m$  el valor observado  $y_i$  y el valor predicho por el modelo,  $f(t_i)$  se parezcan lo más posible.

Uno podría pensar en elegir aquella  $f$  para la cual la suma de estas diferencias,  $\sum_{i=1}^m (y_i - f(t_i))$  sea cero o lo más cercano a cero.

El problema con esta suma es que los sumandos pueden ser positivos y negativos, por lo que la suma puede dar cero o un valor cercano a cero sencillamente porque hay sumandos de distinto signo que se van compensando, y no porque cada sumando sea pequeño.

Si queremos que  $f(t_i) \simeq y_i \forall i = 1, \dots, m$  necesitaremos que la suma sea cero o cercana a cero si cada sumando lo es.

Podemos lograr esto si en lugar de sumar las diferencias  $y_i - f(t_i)$  sumamos sus cuadrados,  $(y_i - f(t_i))^2$ .

En suma deseamos una  $f$  tal que  $\sum_{i=1}^m (y_i - f(t_i))^2$  sea mínima (idealmente nos gustaría que fuese cero), deseamos minimizar la suma de los cuadrados de las distancias entre  $f$  y los datos, de ahí el nombre del método.

Veremos cómo lograrlo.

Recordemos que

$$f(T) = \begin{pmatrix} f(t_1) \\ f(t_2) \\ \vdots \\ f(t_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_1(t_1)x_1 + \varphi_2(t_1)x_2 + \dots + \varphi_n(t_1)x_n \\ \varphi_1(t_2)x_1 + \varphi_2(t_2)x_2 + \dots + \varphi_n(t_2)x_n \\ \vdots \\ \varphi_1(t_m)x_1 + \varphi_2(t_m)x_2 + \dots + \varphi_n(t_m)x_n \end{pmatrix} = A \cdot X$$

Donde  $A$  es la matriz cuyas columnas son  $\varphi_1(T), \varphi_2(T), \dots, \varphi_n(T)$ .

El ideal sería  $\|Y - f(T)\| = 0$  o lo que es lo mismo,

$\|Y - f(T)\|^2 = \sum_{i=1}^m (y_i - f(t_i))^2 = 0$  (trabajamos con el cuadrado de la norma, así evitamos la raíz cuadrada).

$$\text{Esto se traduce en que se cumpla } \begin{pmatrix} f(t_1) \\ f(t_2) \\ \vdots \\ f(t_m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

$$\text{Esto es, } (S) \begin{cases} \varphi_1(t_1)x_1 + \varphi_2(t_1)x_2 + \dots + \varphi_n(t_1)x_n & y_1 \\ \varphi_1(t_2)x_1 + \varphi_2(t_2)x_2 + \dots + \varphi_n(t_2)x_n & y_2 \\ \vdots & \vdots \\ \varphi_1(t_m)x_1 + \varphi_2(t_m)x_2 + \dots + \varphi_n(t_m)x_n & y_m \end{cases} =$$

En esta ocasión el término independiente es  $Y$  en vez de  $B$ .

Típicamente el sistema será incompatible, por lo que buscaremos la solución aproximada.

En este caso el subespacio generado por las columnas de la matriz será  $S = [\varphi_1(T), \varphi_2(T), \dots, \varphi_n(T)]$ .

Aplicando lo que ya vimos, la mejor  $f$  será aquella tal que  $f(T) = Y'$ , aquella  $f$  tal que  $f(T) = P_S(Y)$ .

Ya sabemos que los coeficientes  $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  asociados a dicha  $f$  serán la solución del sistema  $(A^t \cdot A \cdot X = A^t \cdot Y)$ .

Por tanto, dados los datos  $(t_i, y_i)$ ,  $i = 1, \dots, m$  y la familia de funciones  $\phi = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\}$  (a partir de la cual construiremos un modelo  $f$  mediante combinación lineal de las funciones en  $\phi$ ):

1. Construimos la matriz  $A$  de columnas  $\varphi_1(T), \varphi_2(T), \dots, \varphi_n(T)$ .
2. Construimos la matriz  $A^t \cdot A$  y el término independiente  $A^t \cdot Y$ .
3. Resolvemos el sistema  $(A^t \cdot A) \cdot X = A^t \cdot Y$  obteniendo  $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ .
4. Obtenemos nuestra  $f = x_1 \varphi_1 + x_2 \varphi_2 + \dots + x_n \varphi_n$ .

## 6 Observaciones

1. La familia  $\phi$  se fija de antemano, en general es dictada por la experiencia en problemas similares.
2. Una vez fijada  $\phi$ , para cada conjunto de datos  $T, Y$  tendremos una matriz  $A$  de columnas  $\varphi_1(T), \varphi_2(T), \dots, \varphi_n(T)$ .
3. El método de mínimos cuadrados nos proporciona los coeficientes  $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  con los que fabricamos la mejor  $f$ , aquella que minimiza  $\|Y - f(T)\|^2 = \sum_{i=1}^m (y_i - f(t_i))^2$ .
4. Si cambiamos los datos, cambiará la matriz (aunque sigamos con la misma familia  $\phi$ ) y por tanto cambiará el sistema del que sacamos  $X$  y por tanto tendremos otra  $f$ .
5. Si elegimos mal la familia  $\phi$  (esto es, estamos buscando al mejor modelo de una familia equivocada), los resultados pueden ser malos y eso no es achacable al método. El método encuentra lo mejor dentro de un conjunto fijado de antemano, y si el conjunto fue mal elegido la culpa no es del método.

## 7 Ejemplos

### Ejemplo 1

Volvamos a nuestros 601 datos. La figura (2) sugiere que nuestra nube de puntos tiene forma de parábola, por lo que un modelo adecuado sería una  $f$  del tipo  $f(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2$ , un polinomio de segundo grado.

Tenemos  $\phi = \{\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3\}$  con  $\varphi_1(t) = 1 \forall t$ ,  $\varphi_2(t) = t^2$  y  $\varphi_3(t) = t^2$ .

La matriz  $A$  es una matriz de 601 filas y 3 columnas, pero el sistema  $(A^t \cdot A)X = A^t \cdot Y$  es un sistema  $3 \times 3$ .

El tamaño de este sistema no depende de la cantidad de datos, sino de la complejidad del modelo, de la cantidad de funciones  $\varphi$  que lo forman.

En este ejemplo obtenemos  $x_1 = 0.064$ ,  $x_2 = -0.069$ ,  $x_3 = 1.014$ , por tanto  $f(t) = 0.064 - 0.069t + 1.014t^2$ .

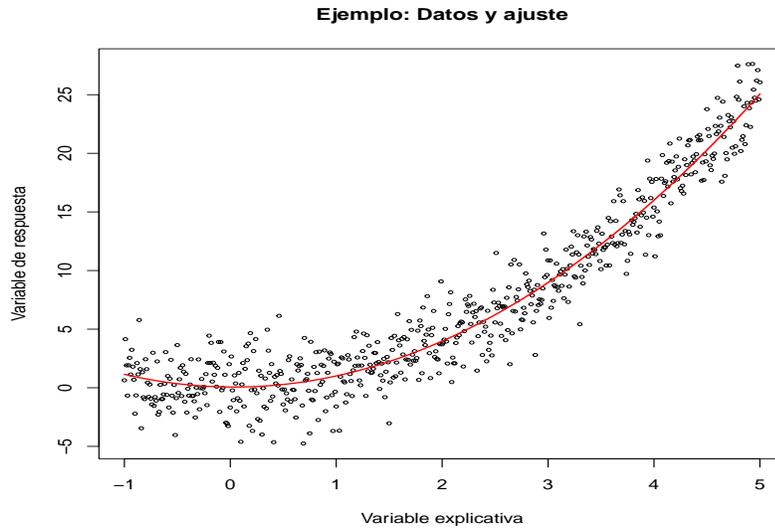


Fig. 3: Datos y modelo de segundo grado

Si graficamos  $f(t)$  para  $c/u$  de los 601 valores  $t_1, \dots, t_{601}$  obtenemos la figura (3).

Si en lugar de elegir un modelo polinómico de segundo grado elegimos uno de primer grado, tendremos  $g(t) = x'_1\varphi_1(t) + x'_2\varphi_2(t) = x'_1 + x'_2t$ .

Ahora el sistema  $(A^t \cdot A)X = A^t \cdot Y$  quedará  $2 \times 2$  ya que la matriz  $A$  es de 601 filas y 2 columnas.

Obtenemos  $g(t) = -0.940 + 3.986t$ . La figura (4) muestra ambos modelos junto con los datos.

Es claro que la mejor recta posible va a hacer un peor trabajo que la mejor parábola posible para aproximar esa nube de puntos.

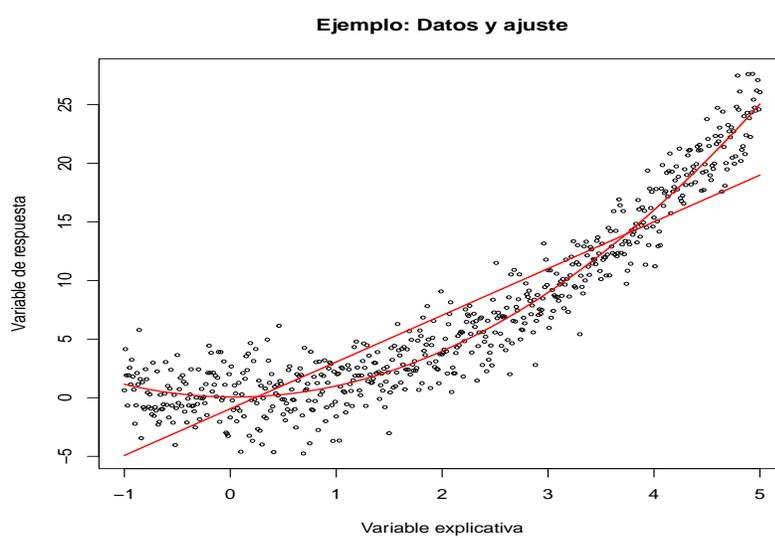


Fig. 4: Datos y dos modelos, de primer y segundo grado