FACULTAD DE INGENIERÍA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS

Mínimos Cuadrados

Fìs. Sergio Roberto Arzamendi Pèrez

Departamento de Álgebra Lineal

1. Antecedentes

Producto interno usual en R^n

El producto interno usual en R^n que se define por

$$(\, \overline{x} \mid \overline{y} \,) = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$

$$\forall\, \overline{x} = (\, x_1, x_2, \cdots, x_n \,),\ \overline{y} = (\, y_1, y_2, \cdots, y_n \,) \in R^n$$

puede verse también como el producto de las matrices

$$\overline{x}^T\, \overline{y} = (\; x_1 \; x_2 \cdots x_n \;) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$

en donde los vectores ***x*** y ***y*** son pensados como vectores columnas.

Multiplicación de matrices como una combinación lineal

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+2y+3z \\ 2x+y+2z \\ 4x+3y+2z \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = x\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix} + y\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix} + z\begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Si $A = \left(\, A_1 \,\middle|\, A_2 \,\middle|\, \cdots \,\middle|\, A_n \, \right)$ es una matriz de n columnas y $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$

un vector columna de n renglones entonces el producto Ax puede escribirse como:

$$Ax = x_1 A_1 + x_2 A_2 + \cdots + x_n A_n$$

Es decir, Ax es una combinación lineal de las columnas de A.

Sistemas de ecuaciones lineales

Sea S el sistema de ecuaciones lineales

$$S:\begin{cases} ax_1 + bx_2 + cx_3 = y_1 \\ dx_1 + ex_2 + fx_3 = y_2 \\ gx_1 + hx_2 + ix_3 = y_3 \end{cases}$$

Si construimos las matrices:

$$A = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}, \quad \overline{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \overline{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

Sistemas de ecuaciones lineales

El sistema de ecuaciones *S* queda representado por la ecuación matricial:

$$A\overline{x} = \overline{y}$$

que también puede expresarse como

$$A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3 = \overline{y}$$

Es decir, estamos expresando al vector $\boldsymbol{y}$ como una combinación lineal de las columnas de la matriz *A*.

Sistemas de ecuaciones lineales

Entonces el sistema de ecuaciones lineales *S*: $A\overline{x} = \overline{y}$

$$A_1 x_1 + A_2 x_2 + \cdots + A_n x_n = \overline{y}$$

será:

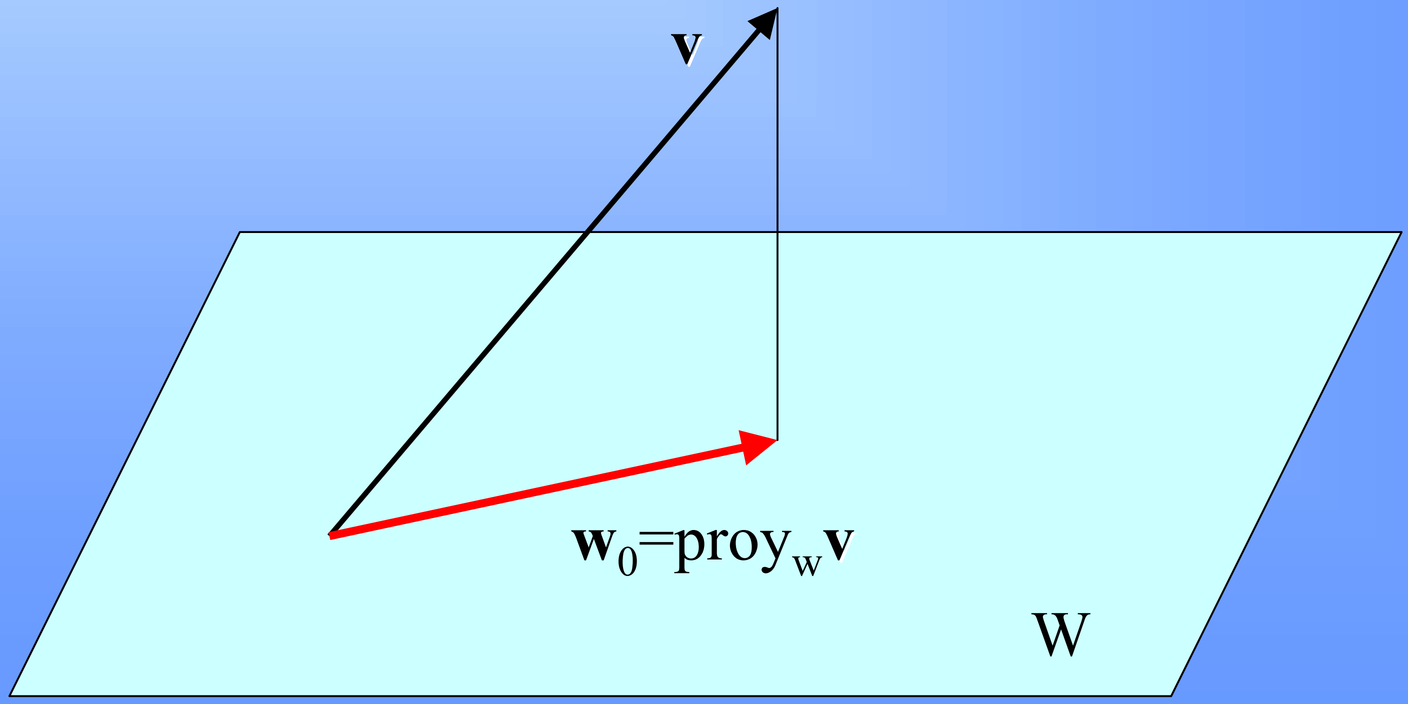
a) compatible si ***y*** pertenece al espacio columna de *A*, e

b) incompatible si ***y*** *no* pertenece al espacio columna de *A*.

El teorema de la proyección

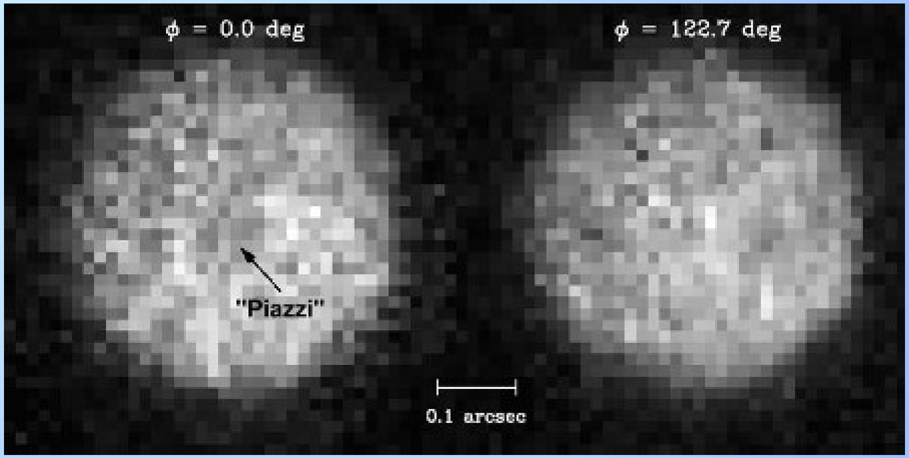
Sean V un espacio vectorial con producto interno, W un subespacio de V y $\mathbf{v} \in$ V. Existe un único vector $\mathbf{w_0} \in$ W tal que

$$\| \overline{v} - \overline{w}_0 \| < \| \overline{v} - \overline{w} \| \quad \forall\ \overline{w} \in \mathrm{W},\ \overline{w} \neq \overline{w}_0$$



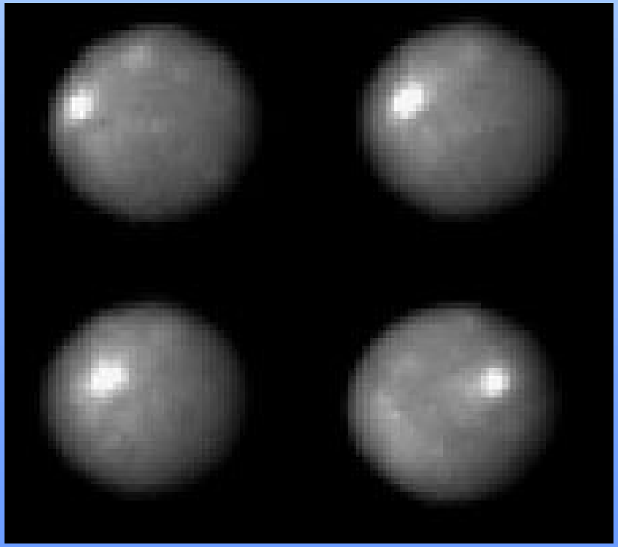
2. Problema general de los mínimos cuadrados

Guiseppe Piazzi, nacido en Valtellina en 1746 y fallecido en 1826, fue un clérigo italiano que durante años dirigió el Observatorio de Palermo. Estaba trabajando en la compilación de un nuevo y detallado catálogo estelar cuando, justo en el cambio de siglo, del 18 al 19, descurió un punto luminoso en la constelación de Taurus que no aparecía en los mapas que disponía. Seguido durante las noches siguientes, pudo comprobar su lento desplazamiento entre las estrellas fijas. Descartado que se tratara de un cometa, prosiguió con sus observaciones con ayuda de otros colegas. El matemático alemán Karl Freidrich Gauss calculó su órbita y en la oposición siguiente se pudo recuperar, con lo que quedaba confirmado que poseía una órbita planetaria: se trataba de Ceres, el primer asteroide descubierto.



Ceres

243 Ida



Problema de mínimos cuadrados

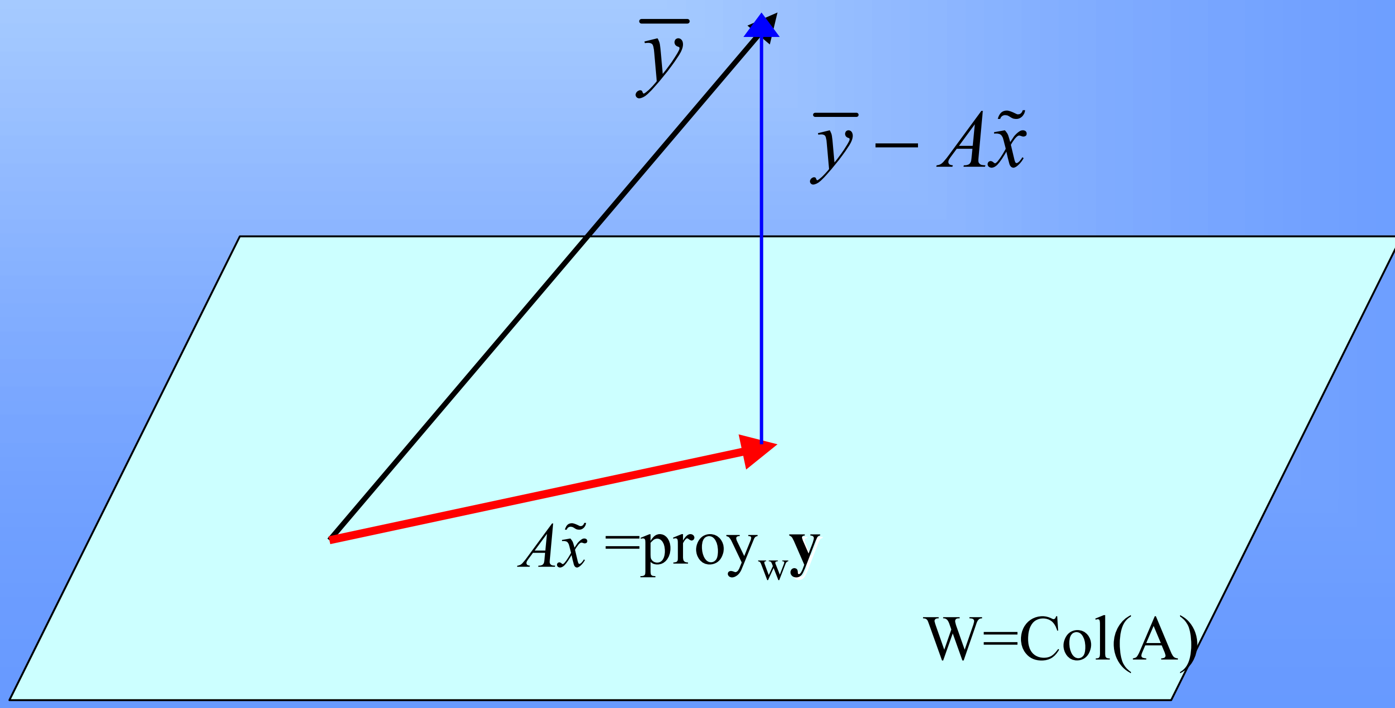
- Consideremos un sistema de ecuaciones lineales incompatible ***Ax=y***.
- Se busca entonces una solución aproximada al sistema de ecuaciones.
- Se piensa en ***Ax*** como una aproximación de ***y***.
- En un espacio con producto interno, cuanto más corta sea la distancia entre ***Ax*** y ***y*** mejor será la aproximación señalada. Esta distancia se calcula con la expresión

$$\| \overline{y} - A\overline{x} \|$$

Problema de mínimos cuadrados

Entonces, de acuerdo con el teorema de la proyección, existe un único vector $A\tilde{x}$ en el espacio columna de $\boldsymbol{A}$, tal que

$$\| \bar{y} - A\tilde{x} \| < \| \bar{y} - A\bar{x} \| \quad \forall\ A\bar{x} \in \mathrm{Col}(A)$$



Solución al problema de mínimos cuadrados

- Si R^n es un espacio con producto interno usual, entonces cada columna de $A\tilde{x}$ es ortogonal al vector $\boldsymbol{y} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ de la figura, esto es:

$$\left(A_i \mid \overline{y} - A\tilde{x} \right) = 0$$

$$A^T (\overline{y} - A\tilde{x}) = 0$$

$$A^T \overline{y} - A^T A\tilde{x} = 0$$

$$A^T A\tilde{x} = A^T \overline{y}$$

Solución al problema de mínimos cuadrados

La ecuación matricial

$$A^T A\tilde{x} = A^T \overline{y}$$

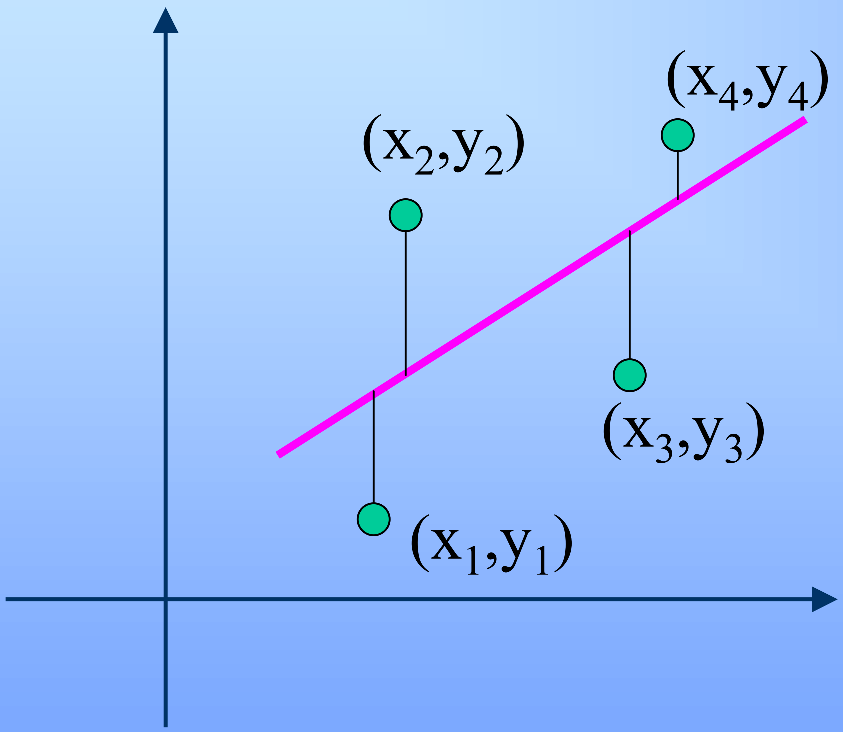
representa un sistema de ecuaciones lineales al que se conoce como ***ecuaciones normales*** y su solución es también la solución al problema de mínimos cuadrados

$$A\overline{x} = \overline{y}$$

para un sistema incompatible.

3. Aplicaciones

Líneas de mínimos cuadrados

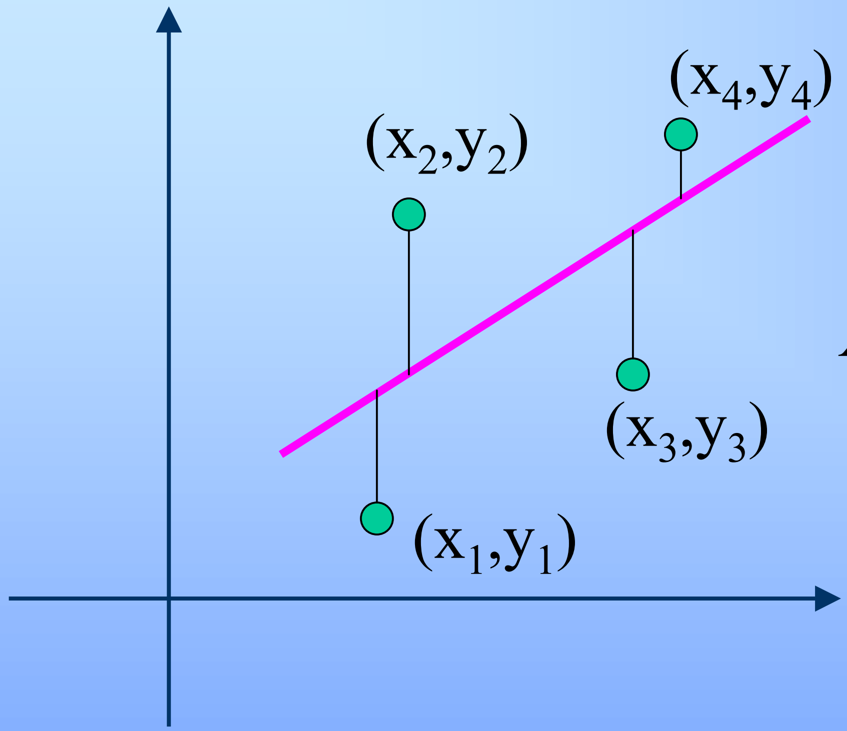


Sea L la línea recta que mejor se ajusta a los datos dados y su ecuación :

$$b + mx = y$$

$$S : \begin{cases} b + mx_1 = y_1 \\ b + mx_2 = y_2 \\ b + mx_3 = y_3 \\ b + mx_4 = y_4 \end{cases}$$

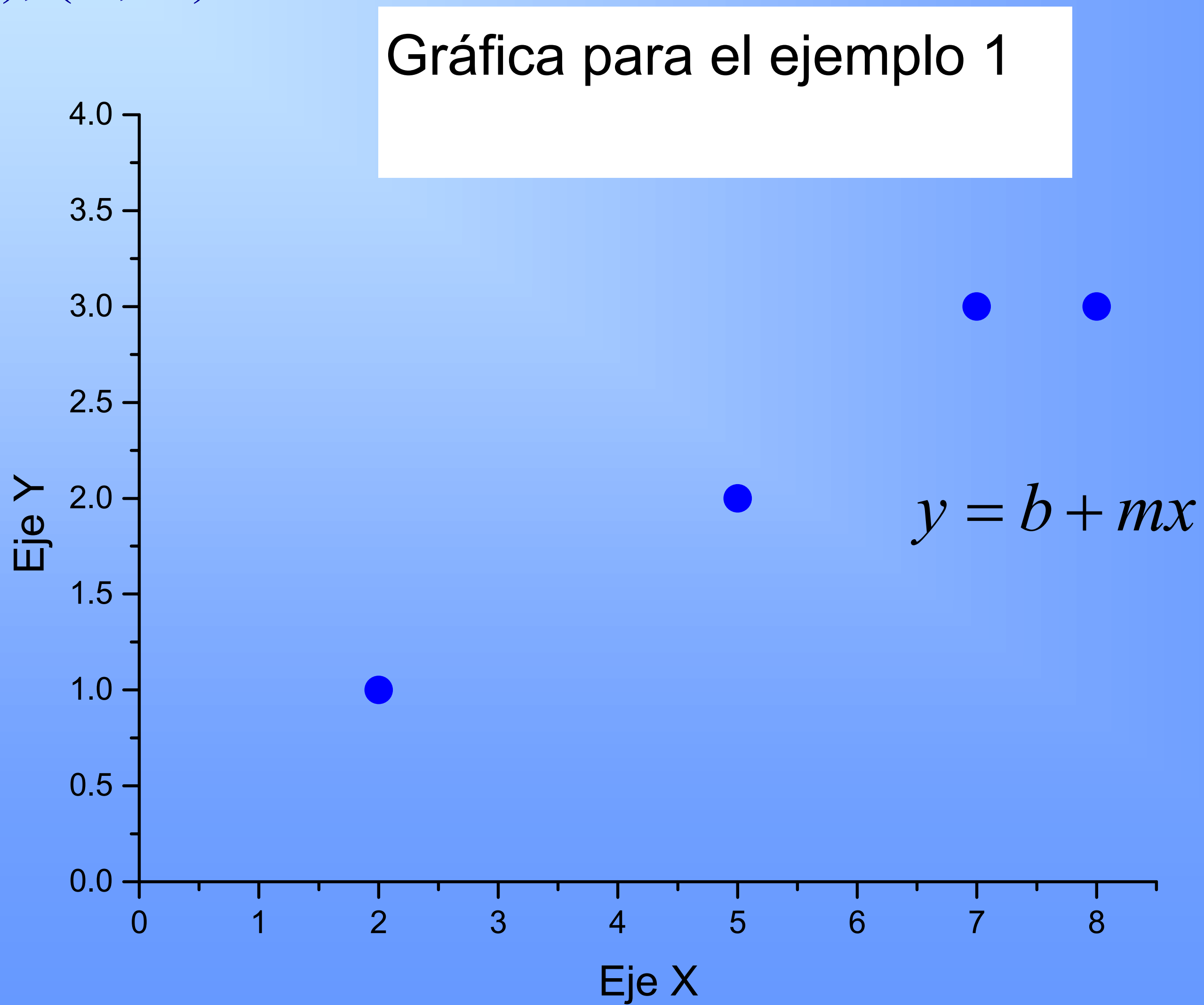
Líneas de mínimos cuadrados



$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & x_3 \\ 1 & x_4 \end{pmatrix}, \quad \bar{x} = \begin{pmatrix} b \\ m \end{pmatrix}, \quad \bar{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix}$$

que da lugar a la ecuación matricial $A\bar{x} = \bar{y}$

Ejemplo 1: Determinar la ecuación de la recta de mínimos cuadrados que se ajuste mejor a los puntos (2, 1), (5, 2), (7, 3), (8, 3).



Solución:

Con las coordenadas de los datos podemos construir las matrices:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 5 \\ 1 & 7 \\ 1 & 8 \end{pmatrix}, \quad \bar{x} = \begin{pmatrix} b \\ m \end{pmatrix}, \quad \bar{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

que dan lugar al problema de mínimos cuadrados: $A\bar{x} = \bar{y}$

cuya solución es la de las ecuaciones normales: $A^T A\tilde{x} = A^T \bar{y}$

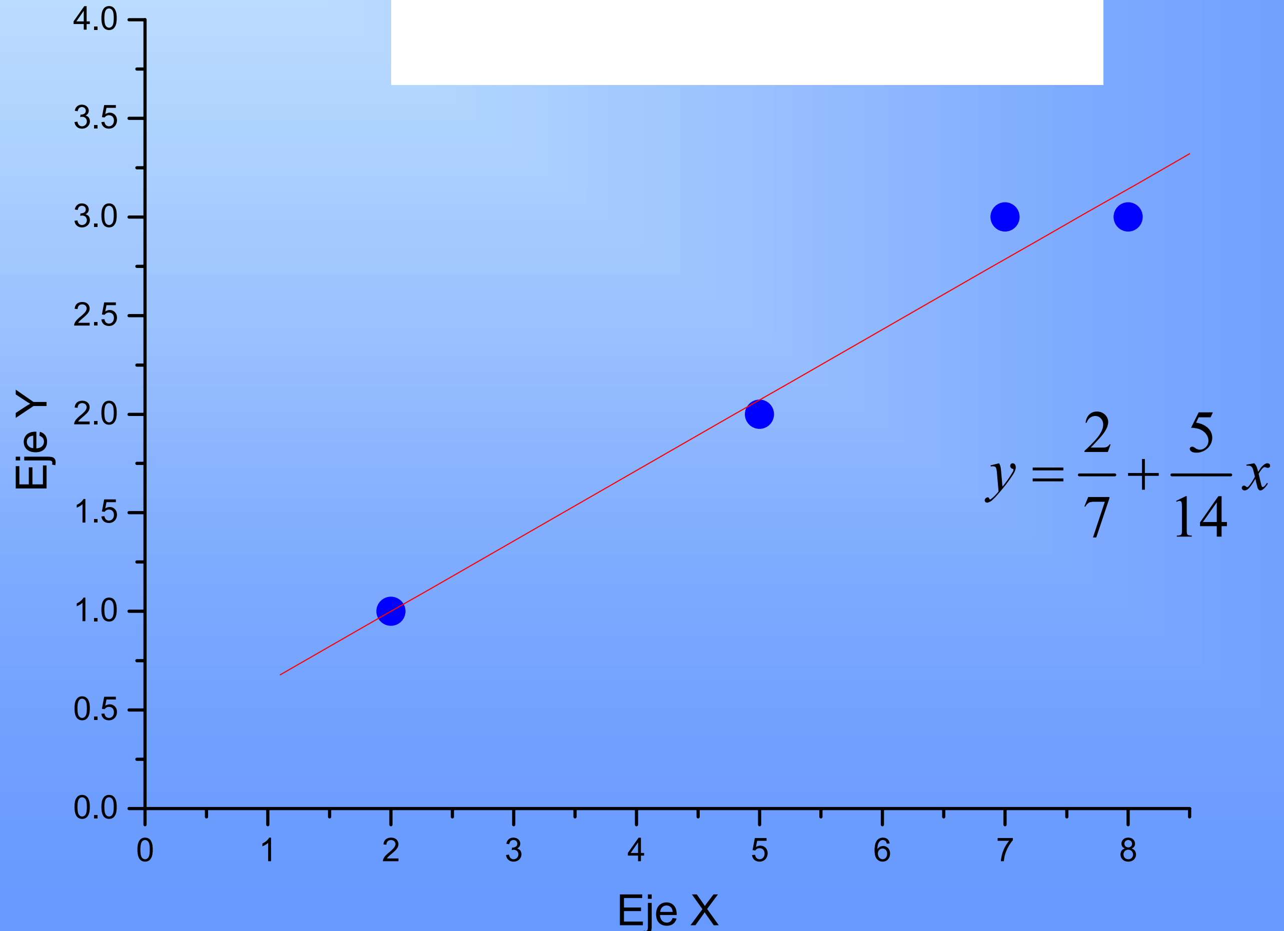
$$A^T A = \begin{pmatrix} 4 & 22 \\ 22 & 142 \end{pmatrix}, \quad A^T \bar{y} = \begin{pmatrix} 9 \\ 57 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} 4 & 22 \\ 22 & 142 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 \\ 57 \end{pmatrix}$$

Solución:

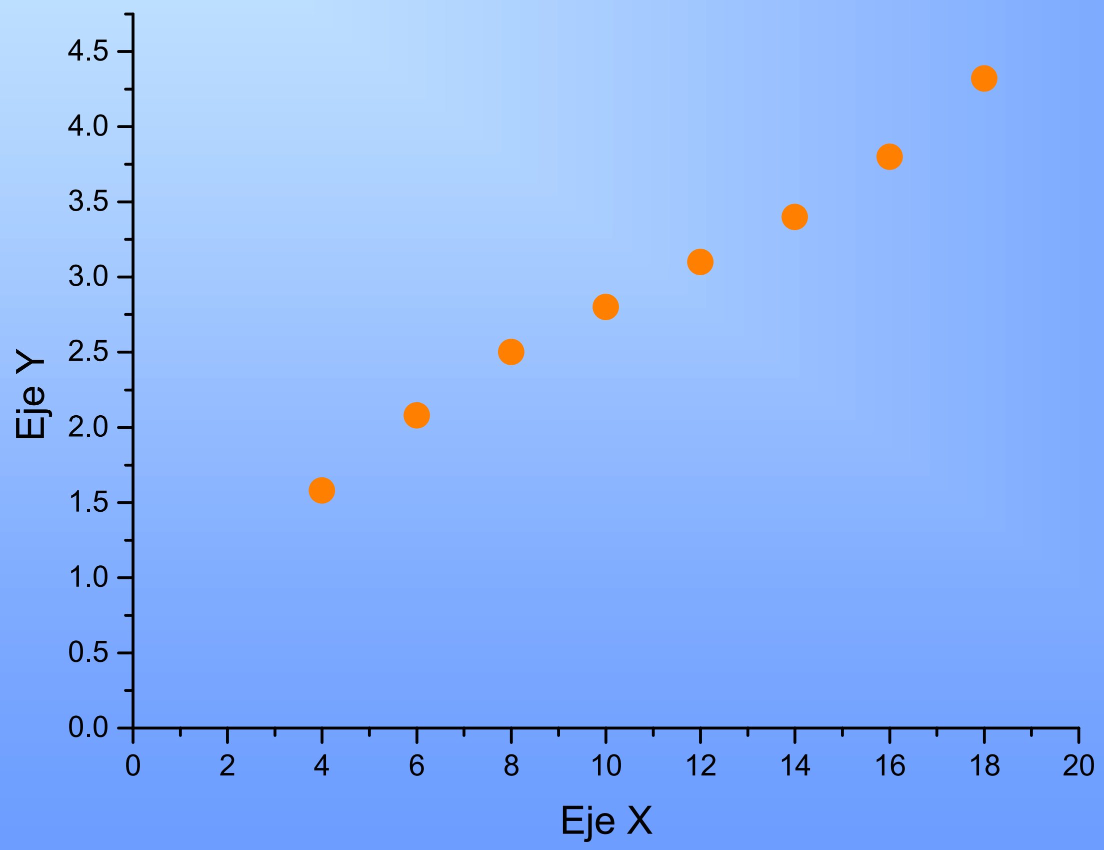
Resolviendo el sistema de ecuaciones normales:

$$\bar{x} = \begin{pmatrix} \frac{2}{7} \\ \frac{5}{14} \end{pmatrix}$$

Gráfica para el ejemplo 1



Ejemplo 2: Determine la curva de mínimos cuadrados de tercer grado que se ajuste a los datos: (4, 1.58), (6, 2.08), (8, 2.5), (10, 2.8), (12, 3.1), (14, 3.4), (16, 3.8), (18, 4.32).



Solución:

En este caso la ecuación a a la que deseamos se ajusten los datos es de la forma:

$$y = a + bx + cx^2 + dx^3$$

$$S: \begin{cases} y_1 = a + bx_1 + cx_1{}^2 + dx_1{}^3 \\ y_2 = a + bx_2 + cx_2{}^2 + dx_2{}^3 \\ y_3 = a + bx_3 + cx_3{}^2 + dx_3{}^3 \\ y_4 = a + bx_4 + cx_4{}^2 + dx_4{}^3 \\ y_5 = a + bx_5 + cx_5{}^2 + dx_5{}^3 \\ y_6 = a + bx_6 + cx_6{}^2 + dx_6{}^3 \\ y_7 = a + bx_7 + cx_7{}^2 + dx_7{}^3 \\ y_8 = a + bx_8 + cx_8{}^2 + dx_8{}^3 \end{cases}$$

$$A\overline{x} = \overline{y}$$

Solución:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 4^2 & 4^3 \\ 1 & 6 & 6^2 & 6^3 \\ 1 & 8 & 8^2 & 8^3 \\ 1 & 10 & 10^2 & 10^3 \\ 1 & 12 & 12^2 & 12^3 \\ 1 & 14 & 14^2 & 14^3 \\ 1 & 16 & 16^2 & 16^3 \\ 1 & 18 & 18^2 & 18^3 \end{pmatrix}, \quad \overline{x} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} \quad \overline{y} = \begin{pmatrix} 1.58 \\ 2.08 \\ 2.5 \\ 2.8 \\ 3.1 \\ 3.4 \\ 3.8 \\ 4.32 \end{pmatrix}$$

$$A\overline{x} = \overline{y}$$

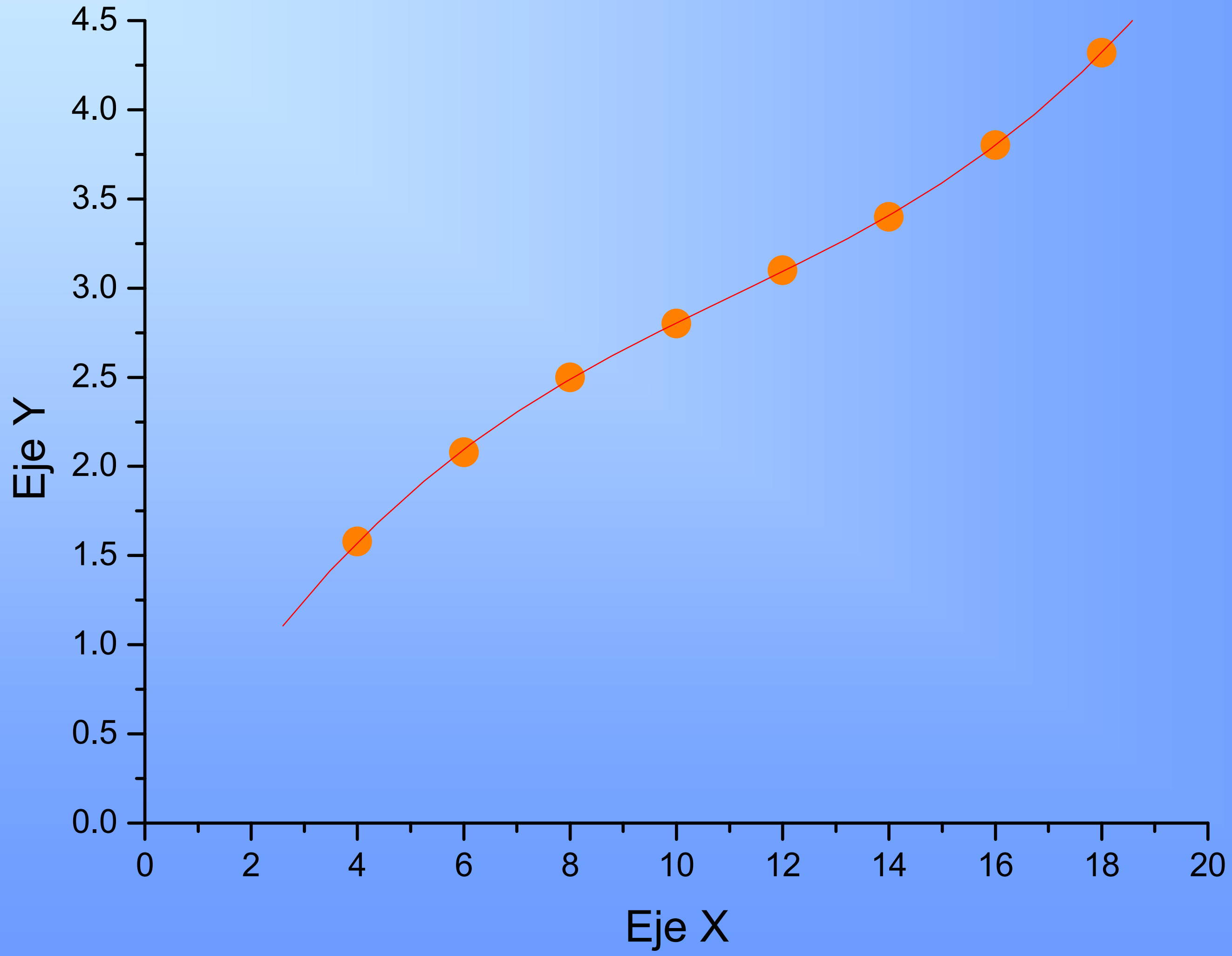
Solución:

Las ecuaciones normales son: $A^T A\tilde{x} = A^T \overline{y}$

$$\begin{pmatrix} 8 & 88 & 1136 & 16192 \\ 88 & 1136 & 16192 & 245312 \\ 1136 & 16192 & 245312 & 3866368 \\ 16192 & 245312 & 3866368 & 62617856 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = (0.0001) \begin{pmatrix} 0.0024 \\ 0.0290 \\ 0.4025 \\ 6.0076 \end{pmatrix}$$

cuyas soluciones son $a = -0.0567$, $b = 0.5317$, $c = -0.0352$, $d = 0.0011$

$$y = -0.0567 + (0.5317)x - (0.0352)x^2 + (0.0011)x^3$$



Ejemplo 3: Según la primera ley de Kepler, un cometa debe tener una órbita elíptica, parábolica o hiperbólica. En coordenadas polares, y tomando como foco al sol la órbita tiene la ecuación:

$$r = \frac{a}{1 - e\cos\theta}$$

donde *e* es la excentricidad de la órbita y *a* una constante. Las observaciones de un cometa recientemente descubierto proporcionan los datos siguientes:

θ	0.88	1.10	1.42	1.77	2.14
r	3.00	2.30	1.65	1.25	1.01

Determinar el tipo de órbita y predecir la posición del cometa cuando el ángulo es 4.6 rad.

Solución:

La ecuación de la órbita se puede escribir como:

$$r = a + er\cos\theta$$

$$S:\begin{cases} r_1 = a + er_1\cos\theta_1 \\ r_2 = a + er_2\cos\theta_2 \\ r_3 = a + er_3\cos\theta_3 \\ r_4 = a + er_4\cos\theta_4 \\ r_5 = a + er_5\cos\theta_5 \end{cases} \qquad A = \begin{pmatrix} 1 & r_1\cos\theta_1 \\ 1 & r_2\cos\theta_2 \\ 1 & r_3\cos\theta_3 \\ 1 & r_4\cos\theta_4 \\ 1 & r_5\cos\theta_5 \end{pmatrix}, \qquad \bar{y} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ r_4 \\ r_5 \end{pmatrix}$$

$$\bar{x} = \begin{pmatrix} a \\ e \end{pmatrix}$$

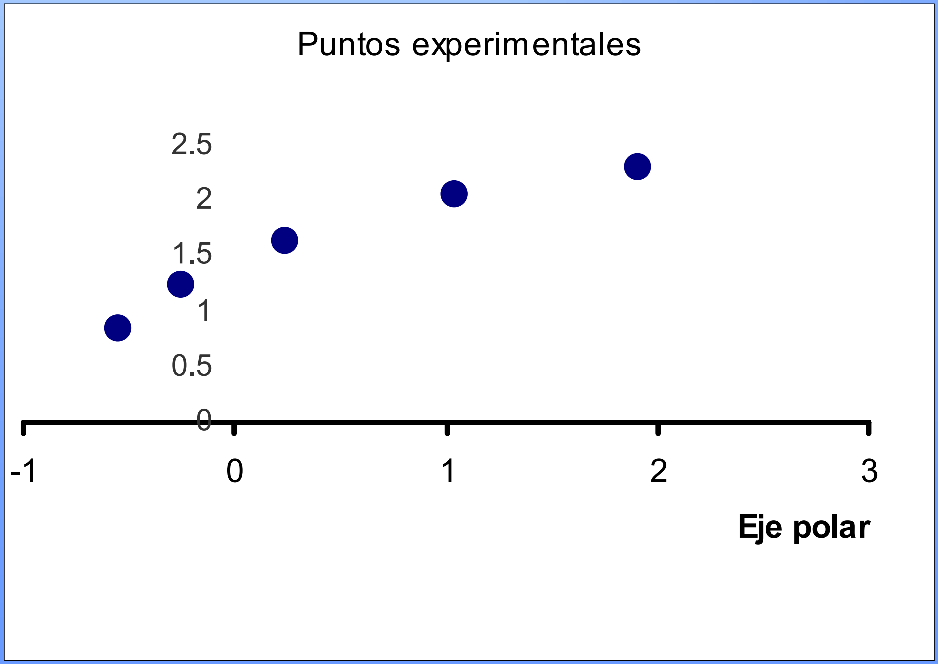
Solución:

Las ecuaciones normales para el problema son $A^T A\tilde{x} = A^T \overline{y}$

$$\begin{pmatrix} 5 & 2.411 \\ 2.411 & 5.161 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.21 \\ 7.684 \end{pmatrix}$$

cuya solución es: $a = 1.41$ y $e = 0.811$.

Por lo tanto, el cometa describe una trayectoría elíptica.



Ejemplo 4: La masa m de una sustancia radiactiva con constante de decaimiento μ puede obtenerse a partir de la expresión:

$$m = m_0 e^{-\mu t}$$

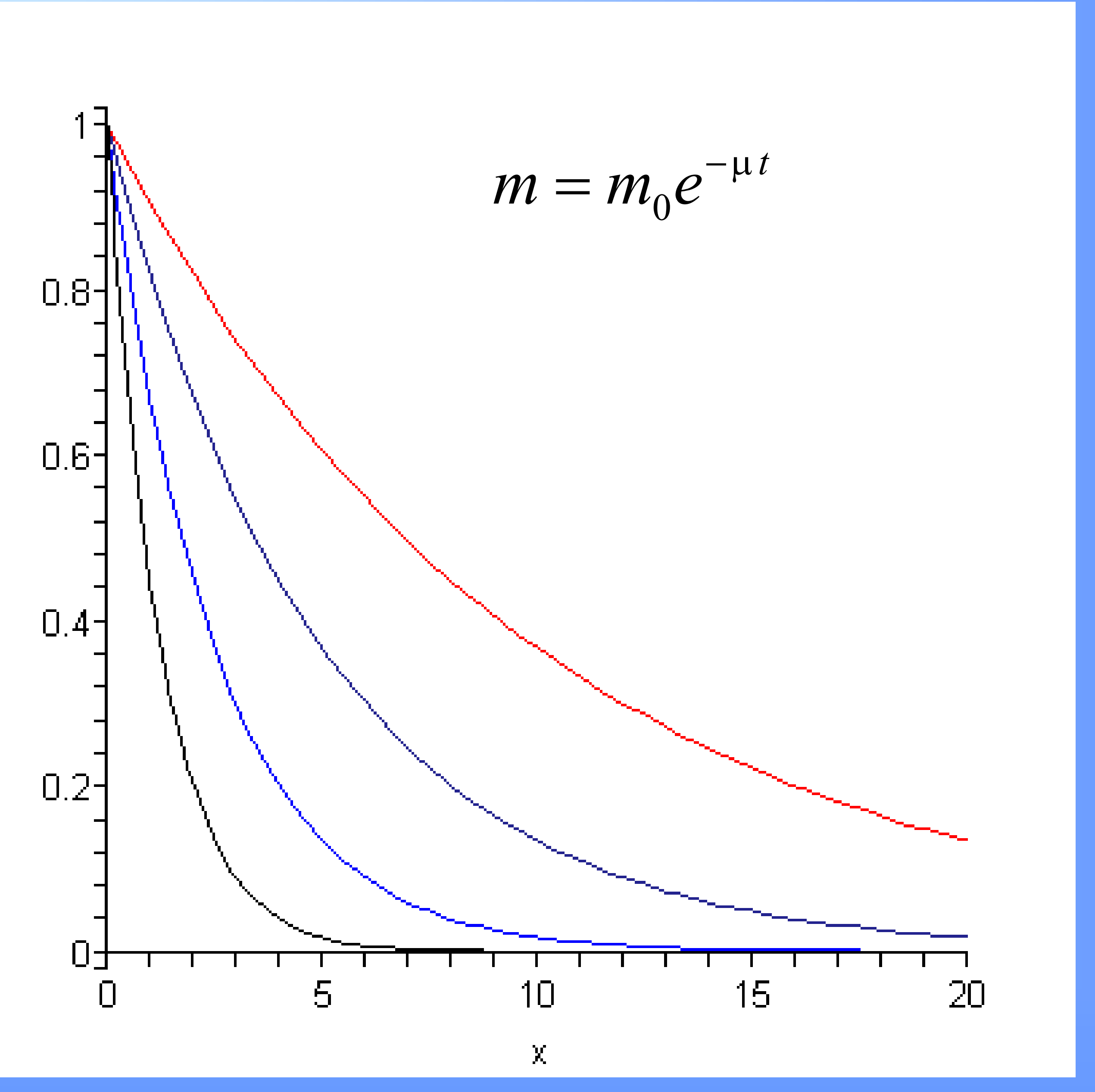
donde m_0 es la masa de la sustancia al tiempo t=0.

Dos sustancias radioactivas A y B tienen constantes de decaimiento μ_A=0.02 y μ_B=0.07, respectivamente. Una mezcla de estas dos sustancias al tiempo t=0 contiene M_A gramos de A y M_B gramos de B.

Al realizar mediciones de la masa de la mezcla a distintos tiempos se obtiene la siguiente tabla:

t (s)	10	11	12	14	15
M (g)	21.34	20.68	20.05	18.87	18.30

Estimar M_A y M_B.


$m = m_0 e^{-\mu t}$
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
0
5
10
15
20
x

Solución:

La masa de la mezcla puede escribirse como

$$M = M_A e^{-\mu_A t} + M_B e^{-\mu_B t}$$

$$S: \begin{cases} M = M_A e^{-\mu_A t_1} + M_B e^{-\mu_B t_1} \\ M = M_A e^{-\mu_A t_2} + M_B e^{-\mu_B t_2} \\ M = M_A e^{-\mu_A t_3} + M_B e^{-\mu_B t_3} \\ M = M_A e^{-\mu_A t_4} + M_B e^{-\mu_B t_4} \\ M = M_A e^{-\mu_A t_5} + M_B e^{-\mu_B t_5} \end{cases}$$

Se construyen las siguientes matrices para la solución del problema

$$A = \begin{pmatrix} e^{-\mu_A t_1} & e^{-\mu_B t_1} \\ e^{-\mu_A t_2} & e^{-\mu_B t_2} \\ e^{-\mu_A t_3} & e^{-\mu_B t_3} \\ e^{-\mu_A t_4} & e^{-\mu_B t_4} \\ e^{-\mu_A t_5} & e^{-\mu_B t_5} \end{pmatrix}, \qquad \bar{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{pmatrix} \qquad \bar{x} = \begin{pmatrix} M_A \\ M_B \end{pmatrix}$$

Las ecuaciones normales para el problema son $A^T A\tilde{x} = A^T \overline{y}$

$$\begin{pmatrix} 3.0529 & 1.6605 \\ 1.6606 & 0.9106 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_A \\ M_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 77.6510 \\ 42.3130 \end{pmatrix}$$

cuya solución es M_A=19.9410g y M_B=10.1017g.

Ejercicio:

- La presión arterial sistólica p de un niño sano (en mmHg) y su peso w (en libras) se relaciona por la expresión:

$$m+n\ln w=p$$

Utilizar los siguientes datos para estimar la presión arterial sistólica de un niño sano de 100 libras.

w	44	61	81	113	131
p	91	98	103	110	112

Bibliografía

- *Álgebra lineal y sus aplicaciones*
  David C. Lay
  Prentice Hall

Álgebra Lineal. Una introducción moderna
David Poole
Thomson

Apuntes de Álgebra lineal
Eduardo Solar, Leda Speziale
Limusa