Solución del problema de mínimos cuadrados

Objetivos. Conocer el problema de mínimos cuadrados en el caso de rango completo, mostrar que este problema es equivalente al sistema de *ecuaciones normales* y se puede resolver por medio de una descomposición QR reducida.

Requisitos. Gradiente de una forma cuadrática, proyección ortogonal de un vector a un subespacio, descomposición QR reducida.

1. Problema de mínimos cuadrados. Sea $A \in \mathcal{M}_{n\times m}(\mathbb{R})$ tal que $\mathrm{r}(A) = m \le n$ y sea $b \in \mathbb{R}^n$. Buscamos el punto mínimo de la función

$$f(x) = \|Ax - b\|^2. \tag{1}$$

Vamos a mostrar que la función f tiene un único punto mínimo global, que este punto es la solución del *sistema de ecuaciones normales* $A^\top Ax = A^\top b$ y que este punto satisface la ecuación $Rx = Q^\top b$, donde (Q, R) es una descomposición QR reducida de la matriz A.

Razonamiento analítico y algebraico

2. Lema sobre la matriz $\boldsymbol{A^\top A}$. Sea $A \in \mathcal{M}_{n\times m}(\mathbb{R})$ tal que $\mathrm{r}(A) = m \le n$. Entonces $\ker(A) = \{\mathbf{0}_m\}$, y la matriz $A^\top A$ es invertible y positiva definida. Lo último significa que

$$\forall x \in \mathbb{R}^m \setminus \{\mathbf{0}_m\} \qquad x^\top (A^\top A)x > 0.$$

Demostración. I. La condición $\mathrm{r}(A) = m$ significa que las columnas de A son linealmente independientes. El producto Ax se puede escribir como una combinación lineal de las columnas de A:

$$Ax = \sum_{k=1}^{m} A_{*,k} x_k,$$

y esta combinación es cero solamente cuando todos los números $x_1, \ldots, x_m$ son cero. Otro camino para demostrar este parte es aplicar el teorema sobre el rango y la nulidad:

$$\dim(\ker(A)) = m - \dim(\mathrm{im}(A)) = m - \mathrm{r}(A) = m - m = 0.$$

II. Sea $x \in \mathbb{R}^m$. Entonces

$$x^\top A^\top Ax = (Ax)^\top (Ax) = \|Ax\|^2 \ge 0. \tag{2}$$

Además, esta expresión se anula solamente cuando $x \in \ker(A)$, y por la parte I esto pasa solamente cuando $x = \mathbf{0}_m$.

III. Supongamos que $x \in \ker(A^\top A)$, esto es, $A^\top Ax = \mathbf{0}_m$. Entonces la expresión (2) es cero, $Ax = \mathbf{0}_n$ y $x = \mathbf{0}_m$. Hemos demostrado que $\ker(A^\top A) = \{\mathbf{0}_m\}$. Como la matriz $A^\top A$ es cuadrada, esto implica que $A^\top A$ es invertible. $\square$

3. Lema sobre el gradiente de la función asociada al problema de mínimos cuadrados. El gradiente de la función (1) es

$$(\nabla f)(x) = 2A^\top Ax - 2A^\top b.$$

Demostración. Primero escribimos $f(x)$ en la siguiente forma expandida:

$$\begin{aligned} f(x) &= (Ax-b)^\top (Ax-b) = x^\top (A^\top A)x - x^\top A^\top b - b^\top Ax + b^\top b \\ &= x^\top (A^\top A)x - 2(A^\top b)^\top x + \|b\|^2. \end{aligned}$$

Por las fórmulas que hemos deducido antes el gradiente es $2A^\top Ax - 2A^\top b$. □

4. Razonamiento con la matriz hessiana (no se incluye en el examen). El Lema 3 muestra que los puntos críticos de la función f deben ser soluciones del sistema de ecuaciones normales $A^\top Ax = A^\top b$. Ya hemos mostrado que la matriz $A^\top A$ es invertible, luego este sistema tiene una única solución. Es fácil ver que la matriz hessiana de la función f es $2A^\top A$, y ya sabemos que esta matriz es positiva definida. Luego, con un poco más de preparación analítica podríamos concluir que la función f es estrictamente convexa y que su punto crítico es su punto mínimo global estricto. No vamos a suponer que estos temas están bien estudiados y busquemos un razonamiento más elemental.

5. Teorema sobre el problema de mínimos cuadrados y el sistema de ecuaciones normales. Sea $A \in \mathcal{M}_{n\times m}(\mathbb{R})$ tal que $\mathrm{r}(A) = m \le n$ y sea $b \in \mathbb{R}^n$. Entonces el sistema de ecuaciones $A^\top Ax = A^\top b$ tiene una única solución, la cual es el punto mínimo global estricto de la función $f(x) = \|Ax - b\|^2$.

Demostración. Ya hemos demostrado que la matriz $A^\top A$ es invertible, luego el sistema de ecuaciones $A^\top Ax = A^\top b$ tiene una única solución la cual denotemos por u. En otras palabras, pongamos $u = (A^\top A)^{-1}A^\top b$. Es importante que se satisface la igualdad

$$A^\top Au = A^\top b. \tag{3}$$

Sea x un vector arbitrario en $\mathbb{R}^m$. Pongamos $h = x - u$ y demostremos que

$$f(x) - f(u) = h^\top (A^\top A)h. \tag{4}$$

En efecto,

$$\begin{aligned} f(x) - f(u) &= (A(u+h)-b)^\top (A(u+h)-b) - (Au-b)^\top (Au-b) \\ &= (Au-b+Ah)^\top (Au-b+Ah) - (Au-b)^\top (Au-b) \\ &= 2h^\top A^\top (Au-b) + \|Ah\|^2. \end{aligned}$$

El primer sumando es cero por (3), y la fórmula (4) está demostrada. Como la matriz $A^\top A$ es positiva definida, para cualquier vector x en $\mathbb{R}^m \setminus \{u\}$ tendremos $h = x - u \neq \mathbf{0}_m$ y $f(x) > f(u)$. Hemos demostrado que u es el punto mínimo global estricto de la función f. Por supuesto, el punto mínimo global estricto, cuando existe, es único. □

6. Solución del sistema de ecuaciones normales por medio de una factorización QR reducida. Supongamos que A y b son como antes, y que (Q, R) es una factorización QR reducida de la matriz A, esto es, $A = QR$, $Q^\top Q = I_m$ y R es una matriz triangular superior. La hipótesis que $\mathrm{r}(A) = m$ implica que R es invertible, luego $R^\top$ también es invertible. Simplifiquemos el sistema de ecuaciones $A^\top Ax = A^\top b$:

$$R^\top Q^\top QRx = R^\top Q^\top b \quad \iff \quad Rx = Q^\top b.$$

El último sistema es fácil de resolver porque R es triangular superior.

Razonamiento más geométrico

7. Proyección ortogonal sobre un subespacio generado por una lista ortonormal (repaso). Sea S un subespacio de $\mathbb{R}^n$. Para cualquier vector v en $\mathbb{R}^n$ existe un único par de vectores $(u, w) \in S \times S^\perp$ tal que $v = u + w$. El vector u se llama la *proyección ortogonal* del vector v sobre el subespacio S y se denota por $P_S v$. Si $q_1, \ldots, q_m$ es una base ortonormal de S, entonces

$$P_S v = \sum_{k=1}^{m} (q_k^\top v) q_k.$$

En forma matricial, si denotamos por Q a la matriz formada por las columnas $q_1, \ldots, q_m$, entonces

$$P_S = QQ^\top.$$

El vector u es el más cercano al vector v entre todos los elementos de S. Formalmente, si $y \in S \setminus \{u\}$, entonces $\|y - v\| > \|u - v\|$.

8. Teorema sobre la solución del problema de mínimos cuadrados, demostración por medio de una proyección ortogonal. Sea $A \in \mathcal{M}_{n\times m}(\mathbb{R})$ tal que $\mathrm{r}(A) = m \le n$ y sea $b \in \mathbb{R}^n$. Entonces la función $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ definida mediante $f(x) := \|Ax - b\|^2$ tiene un único punto mínimo global estricto, y este punto se puede calcular como $R^{-1}Q^\top b$, donde (Q, R) es una descomposición QR reducida de la matriz A.

Demostración. Pongamos $S = \mathrm{im}(A) = \ell(a_1, \ldots, a_m)$, donde $a_1, \ldots, a_m$ son las columnas de A. Sea (Q, R) una descomposición QR reducida de la matriz A, y sean $q_1, \ldots, q_m$ las columnas de Q. Entonces $S = \mathrm{im}(Q) = \ell(q_1, \ldots, q_m)$. Denotemos por u al elemento de S más cercano a b:

$$u = P_S b = QQ^\top b.$$

Se puede verificar directamente que u está en la imagen de A:

$$u = QRR^{-1}Q^\top b = A(R^{-1}Q^\top b).$$

Más aún, como las columnas de A son linealmente independientes, u es la imagen bajo A de un único vector que denotemos por s:

$$s = R^{-1}Q^\top b.$$

Ahora es obvio que s es el mínimo global estricto de la función f. Lo verifiquemos de manera directa. Si $x \in \mathbb{R}^m \setminus \{s\}$, entonces $Ax \neq As$, esto es, $Ax \neq u$, luego

$$f(x) = \|Ax - b\|^2 > \|u - b\|^2 = \|As - b\|^2 = f(s). \qquad \square$$