Aproximación por mínimos cuadrados

Jana Rodriguez Hertz
GAL2

IMERL

9 de setiembre de 2010

problema

aproximación polinomial de datos

- tenemos N mediciones experimentales

problema

aproximación polinomial de datos

- tenemos N mediciones experimentales
- $(t_1, y_1), \ldots, (t_N, y_N)$

problema

aproximación polinomial de datos

- tenemos N mediciones experimentales
- $(t_1, y_1), \ldots, (t_N, y_N)$
- queremos encontrar un polinomio P tal que

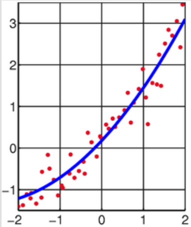
$$P(t_i) \approx y_i \quad i = 1, \ldots, N$$

problema

aproximación polinomial de datos

- tenemos N mediciones experimentales
- $(t_1, y_1), \ldots, (t_N, y_N)$
- queremos encontrar un polinomio P tal que

$$P(t_i) \approx y_i \quad i = 1, \ldots, N$$

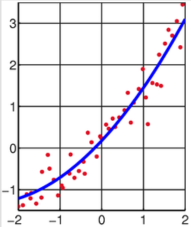
- 

problema

aproximación polinomial de datos

- tenemos N mediciones experimentales
- $(t_1, y_1), \ldots, (t_N, y_N)$
- queremos encontrar un polinomio P tal que

$$P(t_i) \approx y_i \quad i = 1, \ldots, N$$

- 

queremos además
P que mejor aproxime
las mediciones

problema

aproximación por mínimos cuadrados

- cuál es el P que mejor aproxima los datos?

problema

aproximación por mínimos cuadrados

- cuál es el P que mejor aproxima los datos?
- vector error

problema

aproximación por mínimos cuadrados

- cuál es el P que mejor aproxima los datos?
- vector error

$$\vec{\varepsilon}(P) = (y_1 - P(t_1), \ldots, y_N - P(t_N))$$

problema

aproximación por mínimos cuadrados

- cuál es el P que mejor aproxima los datos?
- vector error

$$\vec{\varepsilon}(P) = (y_1 - P(t_1), \ldots, y_N - P(t_N))$$

- buscamos que $\|\vec{\varepsilon}(P)\|$ sea el menor posible:

problema

aproximación por mínimos cuadrados

- cuál es el P que mejor aproxima los datos?
- vector error

$$\vec{\varepsilon}(P) = (y_1 - P(t_1), \dots, y_N - P(t_N))$$

- buscamos que $\|\vec{\varepsilon}(P)\|$ sea el menor posible:
- i.e. dado un grado fijo k, P_0 es el que hace:

problema

aproximación por mínimos cuadrados

- cuál es el P que mejor aproxima los datos?
- vector error

$$\vec{\varepsilon}(P) = (y_1 - P(t_1), \ldots, y_N - P(t_N))$$

- buscamos que $\|\vec{\varepsilon}(P)\|$ sea el menor posible:
- i.e. dado un grado fijo k, P_0 es el que hace:

$$\|\vec{\varepsilon}(P_0)\| = \min_{P \in \mathcal{P}_k(\mathbb{R})} \|\vec{\varepsilon}(P)\|$$

problema

aproximación por mínimos cuadrados

- cuál es el P que mejor aproxima los datos?
- vector error

$$\vec{\varepsilon}(P) = (y_1 - P(t_1), \ldots, y_N - P(t_N))$$

- buscamos que $\|\vec{\varepsilon}(P)\|$ sea el menor posible:
- i.e. dado un grado fijo k, P_0 es el que hace:

$$\|\vec{\varepsilon}(P_0)\| = \min_{P \in \mathcal{P}_k(\mathbb{R})} \|\vec{\varepsilon}(P)\|$$

- (aproximación por mínimos cuadrados)

mínimos cuadrados - recta

recta que aproxima datos

- buscamos recta que mejor aproxima:

mínimos cuadrados - recta

recta que aproxima datos

- buscamos recta que mejor aproxima:
- $(t_1, y_1), \ldots, (t_N, y_N)$

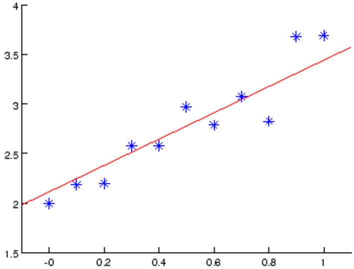
mínimos cuadrados - recta

recta que aproxima datos

- buscamos recta que mejor aproxima:
- $(t_1, y_1), \ldots, (t_N, y_N)$
- (polinomio de grado $k = 1$)

mínimos cuadrados - recta

recta que aproxima datos

- buscamos recta que mejor aproxima:
- $(t_1, y_1), \ldots, (t_N, y_N)$
- (polinomio de grado $k = 1$)
- 

mínimos cuadrados - recta

mínimos cuadrados - recta

- vector error:

mínimos cuadrados - recta

mínimos cuadrados - recta

- vector error:
- $\vec{\varepsilon}(\alpha, \beta) = (y_1 - (\alpha t_1 + \beta), \dots, y_N - (\alpha t_N + \beta))$

mínimos cuadrados - recta

mínimos cuadrados - recta

- vector error:
- $\vec{\varepsilon}(\alpha, \beta) = (y_1 - (\alpha t_1 + \beta), \dots, y_N - (\alpha t_N + \beta))$
- $\vec{\varepsilon}(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} t_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_N & 1 \end{pmatrix} (\alpha, \beta)$

mínimos cuadrados - recta

mínimos cuadrados - recta

- vector error:
- $\vec{\varepsilon}(\alpha, \beta) = (y_1 - (\alpha t_1 + \beta), \ldots, y_N - (\alpha t_N + \beta))$
- $\vec{\varepsilon}(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} t_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_N & 1 \end{pmatrix} (\alpha, \beta) = Y - AX$

mínimos cuadrados - recta

mínimos cuadrados - recta

- vector error:
- $\vec{\varepsilon}(\alpha, \beta) = (y_1 - (\alpha t_1 + \beta), \dots, y_N - (\alpha t_N + \beta))$
- $\vec{\varepsilon}(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} t_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_N & 1 \end{pmatrix} (\alpha, \beta) = Y - AX$
- con $X = (\alpha, \beta)$

mínimos cuadrados - recta

mínimos cuadrados - recta

- vector error:
- $\vec{\varepsilon}(\alpha, \beta) = (y_1 - (\alpha t_1 + \beta), \ldots, y_N - (\alpha t_N + \beta))$
- $\vec{\varepsilon}(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} t_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_N & 1 \end{pmatrix} (\alpha, \beta) = Y - AX$
- con $X = (\alpha, \beta)$
- buscamos $\min_{X \in \mathbb{R}^2} \| Y - AX \|$

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $\min_{X \in \mathbb{R}^2} \|Y - AX\|$, con datos: Y, A

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $\min_{X \in \mathbb{R}^2} \|Y - AX\|$, con datos: Y, A
- ahora $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^2\}$ s.e.v. de $\mathbb{R}^N$

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $\min_{X \in \mathbb{R}^2} \|Y - AX\|$, con datos: Y, A
- ahora $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^2\}$ s.e.v. de $\mathbb{R}^N$
- $\Rightarrow$ min es alcanzado en $AX_0 = P_S(Y)$

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $\min_{X \in \mathbb{R}^2} \|Y - AX\|$, con datos: Y, A
- ahora $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^2\}$ s.e.v. de $\mathbb{R}^N$
- $\Rightarrow$ min es alcanzado en $AX_0 = P_S(Y)$
- o sea, $Y - AX_0 = P_{S^\perp}(Y)$ cumple

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $\min_{X \in \mathbb{R}^2} \| Y - AX \|$, con datos: Y, A
- ahora $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^2\}$ s.e.v. de $\mathbb{R}^N$
- $\Rightarrow$ min es alcanzado en $AX_0 = P_S(Y)$
- o sea, $Y - AX_0 = P_{S^\perp}(Y)$ cumple
- $\| Y - AX_0 \| = \min_{X \in \mathbb{R}^2} \| Y - AX \|$

proposición

proposición

- $A \in \mathcal{M}_{N\times K}(\mathbb{R})$

proposición

proposición

- $A \in \mathcal{M}_{N \times K}(\mathbb{R})$
- $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^K\}$ s.e.v. de $\mathbb{R}^N$

proposición

proposición

- $A \in \mathcal{M}_{N \times K}(\mathbb{R})$
- $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^K\}$ s.e.v. de $\mathbb{R}^N$
- $\Rightarrow$
$$S^{\perp} = \{Y \in \mathbb{R}^N : A^t Y = \vec{0}\}$$

demostración

- $Y \in S^{\perp}$

demostración

- $Y \in S^{\perp}$
- $\Leftrightarrow \langle Y, AX \rangle = 0 \; \forall X \in \mathbb{R}^K$

demostración

- $Y \in S^{\perp}$
- $\Leftrightarrow \langle Y, AX \rangle = 0 \; \forall X \in \mathbb{R}^K$
- $\Leftrightarrow \langle A^t Y, X \rangle = 0 \; \forall X \in \mathbb{R}^K$

demostración

- $Y \in S^{\perp}$
- $\Leftrightarrow \langle Y, AX \rangle = 0 \ \forall X \in \mathbb{R}^K$
- $\Leftrightarrow \langle A^t Y, X \rangle = 0 \ \forall X \in \mathbb{R}^K$
- $\Leftrightarrow A^t Y = \vec{0}$

demostración

- $Y \in S^{\perp}$
- $\Leftrightarrow \langle Y, AX \rangle = 0 \; \forall X \in \mathbb{R}^K$
- $\Leftrightarrow \langle A^t Y, X \rangle = 0 \; \forall X \in \mathbb{R}^K$
- $\Leftrightarrow A^t Y = \vec{0} \in \mathbb{R}^K$

demostración

- $Y \in S^{\perp}$
- $\Leftrightarrow \langle Y, AX \rangle = 0 \ \forall X \in \mathbb{R}^K$
- $\Leftrightarrow \langle A^t Y, X \rangle = 0 \ \forall X \in \mathbb{R}^K$
- $\Leftrightarrow A^t Y = \vec{0} \in \mathbb{R}^K$ $\square$

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $X_0 \in \mathbb{R}^K$ tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^K} \|Y - AX\|$

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $X_0 \in \mathbb{R}^K$ tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^K} \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow Y - AX_0 \in S^{\perp}$

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $X_0 \in \mathbb{R}^K$ tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^K} \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow Y - AX_0 \in S^{\perp}$
- con $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^K\}$ s.e.v. de R^N

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $X_0 \in \mathbb{R}^K$ tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^K} \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow Y - AX_0 \in S^{\perp}$
- con $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^K\}$ s.e.v. de R^N
- $\Rightarrow A^t(Y - AX_0) = \vec{0}$

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $X_0 \in \mathbb{R}^K$ tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^K} \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow Y - AX_0 \in S^\perp$
- con $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^K\}$ s.e.v. de R^N
- $\Rightarrow A^t(Y - AX_0) = \vec{0}$
- $\Rightarrow X_0$ es solución de

$$A^t A X_0 = A^t Y$$

solución del problema

mínimos cuadrados - recta

- buscamos $X_0 \in \mathbb{R}^K$ tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^K} \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow Y - AX_0 \in S^\perp$
- con $S = \{AX : X \in \mathbb{R}^K\}$ s.e.v. de R^N
- $\Rightarrow A^t(Y - AX_0) = \vec{0}$
- $\Rightarrow X_0$ es solución de

$$\boxed{A^tAX_0 = A^tY}$$

- (ecuaciones normales)

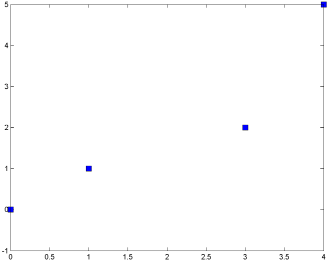
mínimos cuadrados - recta

ejemplo

mínimos cuadrados - recta

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5

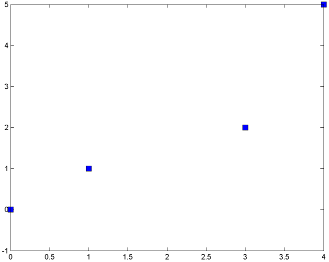


- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ y $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$

mínimos cuadrados - recta

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5

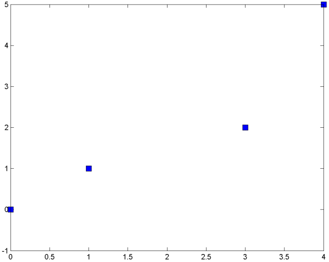


- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ y $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$
- X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min \|Y - AX\|$

mínimos cuadrados - recta

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5

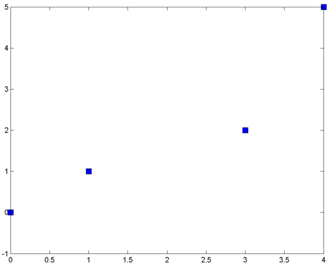


- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ y $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$
- X_0 tal que $\| Y - AX_0 \| = \min \| Y - AX \|$
- $\Rightarrow A^t A X_0 = A^t Y$

mínimos cuadrados - recta

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5

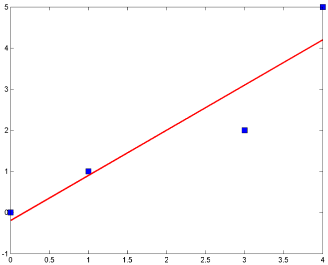


- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ y $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$
- X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow A^t A X_0 = A^t Y$
- $\Rightarrow X_0 = (A^t A)^{-1} A^t Y$

mínimos cuadrados - recta

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5



- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ y $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \\ 3 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$
- X_0 tal que $\| Y - AX_0 \| = \min \| Y - AX \|$
- $\Rightarrow A^t A X_0 = A^t Y$
- $\Rightarrow X_0 = (A^t A)^{-1} A^t Y = (\frac{11}{10}, -\frac{1}{5})$

observación

observación

- $A^t A$ es siempre matriz cuadrada y simétrica

observación

observación

- $A^t A$ es siempre matriz cuadrada y simétrica
- NO SIEMPRE es invertible

observación

observación

- A^tA es siempre matriz cuadrada y simétrica
- NO SIEMPRE es invertible
- caso no invertible: se escaleriza el sistema $A^tAX = A^tY$

observación

observación

- $A^t A$ es siempre matriz cuadrada y simétrica
- NO SIEMPRE es invertible
- caso no invertible: se escaleriza el sistema $A^t AX = A^t Y$
- se verifica que quede compatible

observación

observación

- $A^t A$ es siempre matriz cuadrada y simétrica
- NO SIEMPRE es invertible
- caso no invertible: se escaleriza el sistema $A^t AX = A^t Y$
- se verifica que quede compatible
- se asignan datos que sobran para resolver.

mínimos cuadrados - polinomios

problema

- ahora buscamos polinomio de grado k que minimice

mínimos cuadrados - polinomios

problema

- ahora buscamos polinomio de grado k que minimice
- $\vec{\varepsilon}(P) = (y_1 - (a_k t_1^k + \cdots + a_0), \ldots, y_N - (a_k t_N^k + \cdots + a_0))$

mínimos cuadrados - polinomios

problema

- ahora buscamos polinomio de grado k que minimice
- $\vec{\varepsilon}(P) = (y_1 - (a_k t_1^k + \cdots + a_0), \ldots, y_N - (a_k t_N^k + \cdots + a_0))$
-

$$\vec{\varepsilon}(P) = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} t_1^k & t_1^{k-1} & \ldots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_N^k & t_N^{k-1} & \ldots & 1 \end{pmatrix} (a_k, a_{k-1}, \ldots, a_0)$$

mínimos cuadrados - polinomios

problema

- ahora buscamos polinomio de grado k que minimice
- $\vec{\varepsilon}(P) = (y_1 - (a_k t_1^k + \cdots + a_0), \ldots, y_N - (a_k t_N^k + \cdots + a_0))$
- $$\vec{\varepsilon}(P) = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} t_1^k & t_1^{k-1} & \ldots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_N^k & t_N^{k-1} & \ldots & 1 \end{pmatrix} (a_k, a_{k-1}, \ldots, a_0) = Y - A$$

mínimos cuadrados - polinomios

problema

- ahora buscamos polinomio de grado k que minimice
- $\vec{\varepsilon}(P) = (y_1 - (a_k t_1^k + \cdots + a_0), \ldots, y_N - (a_k t_N^k + \cdots + a_0))$
- $$\vec{\varepsilon}(P) = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} t_1^k & t_1^{k-1} & \ldots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_N^k & t_N^{k-1} & \ldots & 1 \end{pmatrix} (a_k, a_{k-1}, \ldots, a_0) = Y - A$$
- con $X = (a_k, a_{k-1}, \ldots, a_0)$

mínimos cuadrados - polinomios

ejemplo - polinomio

- como antes, buscamos X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^{k+1}} \|Y - AX\|$

mínimos cuadrados - polinomios

ejemplo - polinomio

- como antes, buscamos X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^{k+1}} \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow Y - AX_0 \in S^{\perp}$

$$\text{con} \qquad S = \{AX : X \in \mathbb{R}^{k+1}\} \quad \text{s.e.v. de } \mathbb{R}^N$$

mínimos cuadrados - polinomios

ejemplo - polinomio

- como antes, buscamos X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^{k+1}} \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow Y - AX_0 \in S^{\perp}$

$$\text{con} \qquad S = \{AX : X \in \mathbb{R}^{k+1}\} \quad \text{s.e.v. de } \mathbb{R}^N$$

- $\Rightarrow A^t Y - A^t AX_0 = \vec{0}$

mínimos cuadrados - polinomios

ejemplo - polinomio

- como antes, buscamos X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min_{X \in \mathbb{R}^{k+1}} \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow Y - AX_0 \in S^\perp$

$$\text{con} \qquad S = \{AX : X \in \mathbb{R}^{k+1}\} \quad \text{s.e.v. de } \mathbb{R}^N$$

- $\Rightarrow A^t Y - A^t AX_0 = \vec{0}$
- $\Rightarrow X_0 \in \mathbb{R}^{k+1}$ solución de la ecuación $A^t AX_0 = A^t Y$

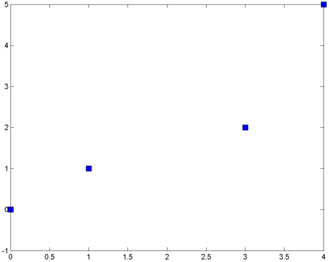
mínimos cuadrados - polinomio

ejemplo

mínimos cuadrados - polinomio

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5

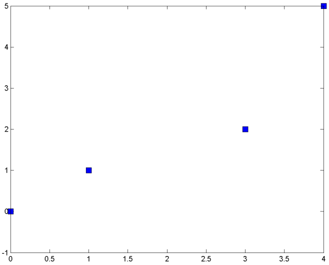


- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \end{pmatrix}$

mínimos cuadrados - polinomio

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5

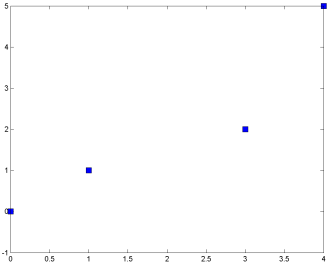


- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \end{pmatrix}$
- X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min_X \|Y - AX\|$

mínimos cuadrados - polinomio

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5

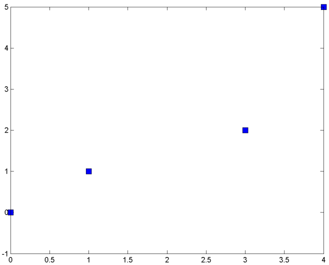


- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \end{pmatrix}$
- X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min_X \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow A^t A X_0 = A^t Y$

mínimos cuadrados - polinomio

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5

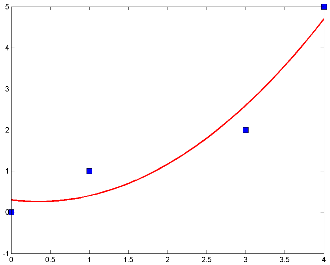


- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \end{pmatrix}$
- X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min_X \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow A^t A X_0 = A^t Y$
- $\Rightarrow$ $X_0 = (A^t A)^{-1} A^t Y$

mínimos cuadrados - polinomio

ejemplo

t	0	1	3	4
y	0	1	2	5



- $Y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \end{pmatrix}$
- X_0 tal que $\|Y - AX_0\| = \min_X \|Y - AX\|$
- $\Rightarrow A^t A X_0 = A^t Y$
- $\Rightarrow$ $X_0 = (A^t A)^{-1} A^t Y = (\frac{1}{3}, -\frac{7}{30}, \frac{3}{10})$