## MATEMÁTICA SUPERIOR APLICADA

### REGRESIÓN LINEAL

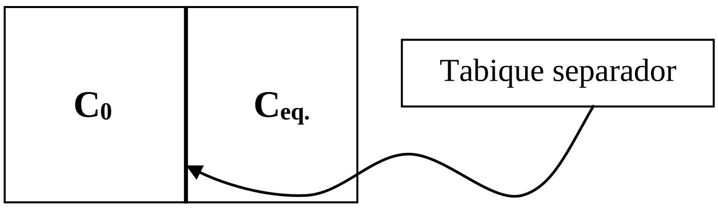
---

**Introducción**

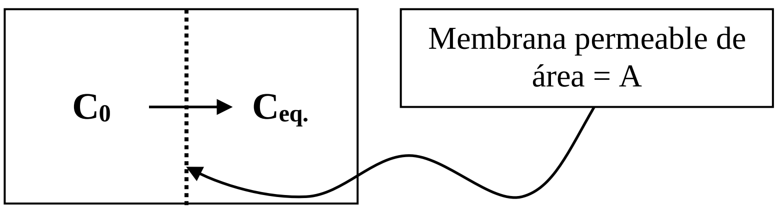
Al motivar la resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas lineales habíamos planteado el problema de ajustar los coeficientes de una parábola que pasa por tres puntos especificados del plano. En este caso, el problema se reducía a resolver un SEAL de 3 ecuaciones con 3 incógnitas, obteniéndose una única solución.

En general, en análisis de datos, lo que se pretende es ajustar una curva a una serie de datos experimentales. Una forma de realizar el ajuste es mediante una regresión lineal. Esto no significa que debemos ajustar los datos a una recta, sino que desarrollamos un algoritmo que reduce el problema a tratar de resolver un SEAL.

Veamos un ejemplo de aplicación: Determinación del coeficiente de transferencia de materia. Supongamos que hemos diseñado un experimento de transferencia de materia que consiste de dos reservorios que contienen soluciones diluidas y que están separados por un tabique divisorio que impide el intercambio de materia:




En el reservorio de la izquierda se tiene una solución diluida con una concentración $C_0$ de soluto. Se supone que el volumen del reservorio de la derecha es mucho mayor que el de la izquierda y la concentración de soluto se mantiene constante en el valor $C_{eq}<C_0$. Si el volumen del reservorio de la izquierda es $V$ y en un instante determinado (t = 0) se retira el tabique de separación dejando expuesta una membrana permeable al soluto, entonces comenzará el proceso de transferencia de soluto desde el reservorio de la izquierda hacia el de la derecha.




La modelización del proceso de transferencia se describe a través de la siguiente ecuación diferencial:

$$V\frac{dC}{dt} = -Ah\left(C - Ceq\right) \tag{1}$$

sujeta a la condición inicial: $C\big|_{t=0} = C_0$

Resolviendo esta ecuación diferencial se obtiene:

$$C = C_{eq} + \left(C_0 - C_{eq}\right)e^{-\left(\frac{hA}{V}t\right)} \tag{2}$$

Deseamos determinar $h$ midiendo $C$ como función del tiempo. Para que podamos utilizar regresión lineal el modelo debe ser lineal en los parámetros de modelización. En este caso, el parámetro $h$ aparece en el exponente. Podemos reescribir la Ecuación (2):

$$C - C_{eq} = \left(C_0 - C_{eq}\right)e^{-\left(\frac{hA}{V}t\right)} \tag{3}$$

Aplicando logaritmo miembro a miembro, resulta:

$$ln\left(C - C_{eq}\right) = ln\left(C_0 - C_{eq}\right) - \frac{hA}{V}t \tag{4}$$

entonces, si graficamos $\ln\left(C - C_{eq}\right)$ *vs.* $\frac{At}{V} = t^*$ obtenemos una recta de pendiente $h$ y ordenada al origen $ln\left(C_0 - C_{eq}\right)$ .

¿Como se obtiene la recta que mejor ajusta los datos experimentales?

Veamos la desviación de los datos de la recta e intentemos minimizar esta distancia de alguna manera. Hagamos un cambio de variable,

$$y \equiv ln\left(C - C_{eq}\right)$$

y redefinamos los parámetros del modelo, así:

$$a \equiv \frac{Ah}{V} \quad , \quad b \equiv ln\left(C_0 - C_{eq}\right)$$

Queremos ajustar los parámetros del modelo $y = at + b$ a N datos experimentales:

$\left(t_i, y_i\right)$ con i = 1, 2, …, N.

Se plantean distintas alternativas para resolver el problema.

## I) Método de mínimos cuadrados

Formamos la siguiente expresión:

$$Suma = \sum_{i=1}^{N}\left[y_i - \left(at_i + b\right)\right]^2 \tag{5}$$

que representa la suma de los cuadrados de las distancias en ordenada entre los valores medidos de concentración y los que suministra el modelo.

Debemos elegir *a* y *b* tal que esa función sea mínima; por consiguiente, planteamos las condiciones necesarias de existencia de extremo (mínimo) para una función de dos variables, esto es:

$$\frac{\partial Suma}{\partial a} = 0$$
$$\frac{\partial Suma}{\partial b} = 0$$

que representa a un sistema de dos ecuaciones lineales con dos incógnitas (*a* y *b*).

Podemos explicitar las derivadas, así:

$$\frac{\partial Suma}{\partial a} = \sum_{i=1}^{N} -2\left[y_i - \left(at_i + b\right)\right]t_i = \sum_{i=1}^{N} -2y_i t_i + 2a\sum_{i=1}^{N} t_i^2 + 2b\sum_{i=1}^{N} t_i = 0 \tag{6}$$

y

$$\frac{\partial Suma}{\partial b} = \sum_{i=1}^{N} -2\left[y_i - \left(at_i + b\right)\right] = \sum_{i=1}^{N} -2y_i + 2a\sum_{i=1}^{N} t_i + 2Nb = 0 \tag{7}$$

Si a partir de un conjunto de *N* datos experimentales ($t_i$, $y_i$) definimos los siguientes valores medios:

$$\bar{t} \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} t_i \;\; ; \;\; \overline{y} \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_i \;\; ; \;\; \overline{ty} \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} t_i y_i \;\; ; \;\; \overline{t^2} \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} t_i^2$$

el sistema de ecuaciones lineales adopta la siguiente forma:

$$\begin{aligned} a\overline{t^2} + b\bar{t} &= \overline{yt} \\ a\bar{t} + b &= \overline{y} \end{aligned} \tag{8}$$

De aquí podemos despejar *a* y *b*, y a partir de ellos los parámetros originales del modelo, así:

$$a = \frac{\overline{yt} - \overline{y}\,\overline{t}}{\overline{t^2} - \bar{t}^2} = -\frac{Ah}{V} \quad \Rightarrow h = -\frac{Va}{A} \tag{9}$$

$$b = \overline{y} - a\bar{t} = ln\left(C_0 - C_{eq}\right) \Rightarrow C_0 = e^b + C_{eq} \tag{10}$$

Esta no es la única manera de resolver el problema. Veámoslo como un sistema de ecuaciones lineales que surge como consecuencia de solicitar a los *N* datos experimentales que satisfagan al modelo.

## II) Ecuaciones Normales

Hagamos que los datos satisfagan el modelo, así:

$$
\begin{aligned}
y_1 &= at_1 & + b \\
y_2 &= at_2 & + b \\
\vdots & \quad \vdots & \vdots \\
y_N &= at_N & + b
\end{aligned}
\tag{11}
$$

Escribamos esto en forma matricial:

$$
\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} t_1 & 1 \\ t_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_N & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}
\tag{12}
$$

Reemplazaremos a los parámetros del modelo con la letra $\underline{x}$ como el vector que contiene los parámetros del modelo, así $x_1 \equiv a$ , $x_2 \equiv b$ . Esto es, queremos que satisfagan el SEAL: $\underline{y} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}$ donde $\underline{\underline{A}}$ representa a la matriz de las funciones de modelización e $\underline{y}$ es el vector de datos experimentales.

En general, el número de datos experimentales es mayor que el número de parámetros a ajustar, razón por la cual el sistema será un sistema sobredimensionado (mayor número de ecuaciones que de incógnitas) y por lo tanto conducirá a un sistema incompatible.

En realidad, lo mejor que podemos hacer es minimizar el residuo $\underline{r} = \underline{y} - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}$ o determinar $\underline{x}$ tal que la norma 2 del residuo $\| \underline{r} \|_2 \equiv \left\| \underline{y} - \underline{\underline{A}} . \underline{x} \right\|_2$ sea tan pequeña como sea posible. En forma equivalente, queremos escoger $\underline{x}$ tal que:

$$
\| \underline{r} \|_2^2 = r^2 = \underline{r}^T . \underline{r} \equiv \left( \underline{y} - \underline{\underline{A}} . \underline{x} \right)^T \cdot \left( \underline{y} - \underline{\underline{A}} . \underline{x} \right) = \underline{y}^T . \underline{y} - \underline{y}^T . \underline{\underline{A}} . \underline{x} - \underline{x}^T . \underline{\underline{A}}^T . \underline{y} + \underline{x}^T . \underline{\underline{A}}^T . \underline{\underline{A}} . \underline{x}
\tag{14}
$$

sea mínima.

Esto es equivalente a lo que hicimos anteriormente con mínimos cuadrados. En efecto, planteamos la condición necesaria de existencia de extremo, pero ahora sobre la norma 2 al cuadrado del vector residuo $\underline{r}$, así:

$$
\underline{\nabla}_{\underline{x}} \| \underline{r} \|_2^2 = \underline{0} \quad donde \;\; \underline{\nabla}_{\underline{x}} \equiv \left[ \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \ldots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right]
\tag{15}
$$

Así, el problema se reduce a resolver el siguiente problema:

$$
\left( \underline{\underline{A}}^T . \underline{\underline{A}} \right) \cdot \underline{x} = \underline{\underline{A}}^T \cdot \underline{y}
\tag{16}
$$

que representa a un sistema de $n$ ecuaciones lineales con $n$ variables (las componentes del vector $\underline{x}$ o vector de parámetros de modelización). Estas ecuaciones se conocen con el nombre de **Ecuaciones Normales.**

Las ecuaciones normales son apropiadas, pero no son un buen camino para resolver el problema de regresión lineal para un número grande de parámetros a ajustar, ya que, en general, conducirá a elevados errores de redondeo.

Con respecto al número de condición del sistema, se puede demostrar que $K\left[\left(\underline{\underline{A}}^T.\underline{\underline{A}}\right),2\right]=\left[K\left(\underline{\underline{A}},2\right)\right]^2$, igualdad que vale sólo en norma 2, dado que, en general, $\underline{\underline{A}}$ es una matriz rectangular. Por lo tanto, el problema conducirá a un problema mal condicionado. Podemos mejorarlo cambiando de metodología.

**III) Factorización QR**

Resolvemos el problema de regresión utilizando la factorización QR de la matriz $\underline{\underline{A}}$. Para ello debemos introducir algunos conceptos previos.

***Transformación ortogonal*:** Una matriz $\underline{\underline{Q}}$ se dice ortogonal si $\underline{\underline{Q}}^T\cdot\underline{\underline{Q}}=\underline{\underline{I}}$. Dado que esto nos dice que $\underline{\underline{Q}}^T=\underline{\underline{Q}}^{-1}$ se deduce que $\underline{\underline{Q}}^T.\underline{\underline{Q}}=\underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{Q}}^T=\underline{\underline{I}}$.

***Propiedad de las transformaciones ortogonales*:** Las matrices ortogonales preservan la norma 2, esto es, $\left\|\underline{\underline{Q}}\cdot\underline{x}\right\|_2=\left\|\underline{x}\right\|_2$

Demostración:

$$\left\|\underline{\underline{Q}}\cdot\underline{x}\right\|_2^2=\left(\underline{\underline{Q}}\cdot\underline{x}\right)^T.\left(\underline{\underline{Q}}\cdot\underline{x}\right)=\underline{x}^T.\underline{\underline{Q}}^T\cdot\underline{\underline{Q}}\cdot\underline{x}=\underline{x}^T.\left(\underline{\underline{Q}}^T\cdot\underline{\underline{Q}}\right)\cdot\underline{x}=\underline{x}^T.\underline{\underline{I}}.\underline{x}=\underline{x}^T.\underline{x}=\left\|\underline{x}\right\|_2^2$$

De donde concluimos que:

$$\left\|\underline{\underline{Q}}\cdot\underline{x}\right\|_2=\left\|\underline{x}\right\|_2$$

Veamos algunos ejemplos de transformaciones ortogonales:

Sea la matriz de permutación $\underline{\underline{P}}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$, luego

$$\underline{\underline{P}}=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\ ;\ \underline{\underline{P}}^T=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\Rightarrow\underline{\underline{P}}^T.\underline{\underline{P}}=\underline{\underline{P}}.\underline{\underline{P}}^T=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

Otros ejemplos de matrices ortogonales:

$$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\ ;\ \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\1\end{pmatrix}\ ;\ \begin{pmatrix}3/5&-4/5\\-4/5&-3/5\end{pmatrix}$$

Todas satisfacen la condición $\underline{\underline{Q}}^T \cdot \underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{Q}} \cdot \underline{\underline{Q}}^T = \underline{\underline{I}}$ (probarlo).

La pregunta que nos formulamos ahora es: ¿Para qué necesitamos esta propiedad en el problema de regresión lineal? Dado que las matrices ortogonales preservan la norma vectorial 2, entonces, el problema de resolver $\underset{\underline{x}}{mín} \left\| \underline{\underline{A}}.\underline{x} - \underline{b} \right\|_2$ es equivalente a:

$$\underset{\underline{x}}{mín} \left\| \underline{\underline{A}}.\underline{x} - \underline{b} \right\|_2 = \underset{\underline{x}}{mín} \left\| \underline{\underline{P}}.\left(\underline{\underline{A}}.\underline{x} - \underline{b}\right) \right\|_2 = \underset{\underline{x}}{mín} \left\| \left(\underline{\underline{P}}.\underline{\underline{A}}\right).\underline{x} - \left(\underline{\underline{P}}.\,\underline{b}\right) \right\|_2$$

donde $\underline{\underline{P}}$ es una matriz ortogonal, pero no cualquier matriz ortogonal. En efecto, queremos encontrar $\underline{\underline{P}}$ tal que $\underline{\underline{P}}.\,\underline{\underline{A}}$ sea de forma triangular superior. ¿Por qué?

Supongamos que existe esa matriz ortogonal $\underline{\underline{P}}$ tal que:

$$\underline{\underline{P}}.\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 7 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \underline{\underline{P}}.\underline{b} = \underline{c} = \begin{pmatrix} 14 \\ 10 \\ 21 \\ 6 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Entonces el problema de regresión se reduciría a encontrar el vector $\underline{x}$ que minimiza $\left\| \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix}.\underline{x} - \underline{c} \right\|_2$ donde $\underline{x}$ es un vector de 3 componentes (igual al número de columnas de $\underline{\underline{R}}$). Por otra parte, resolver $\underset{\underline{x}\neq\underline{0}}{mín} \left\| \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix}.\underline{x} - \underline{c} \right\|_2$ sería equivalente a resolver $\underset{\underline{x}\neq\underline{0}}{mín} \left\| \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix}.\underline{x} - \underline{c} \right\|_2^2$.

Observemos que las tres primeras ecuaciones se pueden resolver exactamente y que las dos últimas filas no tienen efecto sobre $\underline{x}$, así:

$$\left\| \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix}.\underline{x} - \underline{c} \right\|_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} 3 & 4 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 14 \\ 10 \\ 21 \end{pmatrix} \right\|_2^2 + \left\| \begin{matrix} 6 \\ 2 \end{matrix} \right\|_2^2$$

En efecto, la norma al cuadrado es la suma de dos términos no negativos. Para que esta expresión sea mínima el primer término debería ser nulo; esta condición se cumple si $\underline{x}$ satisface el SEAL. Podemos resolver por sustitución hacia atrás:

$$x_3 = \frac{21}{7} = 3 \quad ; \quad x_2 = \frac{10-6}{2} = 2 \quad ; \quad x_1 = \frac{14-3-8}{3} = 1$$

El residuo es: $\left\| \begin{matrix} 6 \\ 2 \end{matrix} \right\|_2 = \sqrt{40}$

Entonces, esta clase de problema es fácil de resolver si podemos encontrar una matriz $\underline{\underline{P}}$ tal que reduzca a la matriz $\underline{\underline{A}}$ de las funciones de modelización a una forma triangular superior.

Veamos como podemos construir esa matriz ortogonal. Para ello debemos presentar algunos conceptos previos.

***Reflector elemental:*** Un reflector elemental $\underline{\underline{P}}$ es una matriz de la forma:

$$\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{I}} - 2\hat{\underline{v}} \otimes \hat{\underline{v}}^T \quad con \ \left\| \hat{\underline{v}} \right\|_2 = 1 \ (versor)$$

donde $\otimes$ representa el producto tensorial o exterior de dos vectores, esto es, si $\hat{\underline{v}} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$,

entonces, $\hat{\underline{v}} \otimes \hat{\underline{v}}^T = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1v_1 & v_1v_2 & v_1v_3 \\ v_2v_1 & v_2v_2 & v_2v_3 \\ v_3v_1 & v_3v_2 & v_3v_3 \end{pmatrix}$. En síntesis, el producto exterior de dos vectores nos suministra un elemento de otro espacio vectorial, en este caso un elemento perteneciente al espacio vectorial de las matrices de dimensión (3x3).

Estas matrices también se conocen con el nombre de *matrices hermíticas elementales* o *Transformaciones de Householder*. Reflejan el espacio vectorial en el hiperplano ortogonal o perpendicular a $\hat{\underline{v}}$. Las matrices $\underline{\underline{P}}$ son simétricas y ortogonales y tienen la siguiente propiedad:

***Propiedad de los reflectores elementales:*** Dados dos vectores $\underline{x}$ e $\underline{y}$ de igual longitud se puede encontrar una matriz $\underline{\underline{P}}$ tal que $\underline{\underline{P}}.\underline{x} = \underline{y}$.

Demostración: Adoptamos como versor de la transformación:

$$\hat{\underline{v}} = \frac{\underline{x} - \underline{y}}{\left\| \underline{x} - \underline{y} \right\|_2}$$

Luego, construimos $\underline{\underline{P}} = \left[ \underline{\underline{I}} - \frac{2\left(\underline{x} - \underline{y}\right) \otimes \left(\underline{x} - \underline{y}\right)^T}{\left\| \underline{x} - \underline{y} \right\|_2^2} \right]$ y lo aplicamos al vector $\underline{x}$,

$$\left[ \underline{\underline{I}} - \frac{2\left(\underline{x} - \underline{y}\right) \otimes \left(\underline{x} - \underline{y}\right)^T}{\left\| \underline{x} - \underline{y} \right\|_2^2} \right].\underline{x} = \underline{x} - \frac{2\left(\underline{x}^T \, . \, \underline{x} - \underline{y}^T \, . \, \underline{x}\right)}{\left(\underline{x} - \underline{y}\right)^T \left(\underline{x} - \underline{y}\right)} \left(\underline{x} - \underline{y}\right)$$

$$= \underline{x} - \frac{2\left(\underline{x}^T \, . \, \underline{x} - \underline{y}^T \, . \, \underline{x}\right)}{\left(\underline{x}^T \, . \, \underline{x} - \underline{y}^T \, . \, \underline{x} - \underline{x}^T . \underline{y} + \underline{y}^T \, . \, \underline{y}\right)} \left(\underline{x} - \underline{y}\right)$$

Dado que:

1. $\underline{x}^T . \underline{x} = \underline{y}^T . \underline{y}$ por hipótesis.
2. $\underline{y}^T . \underline{x} = \underline{x}^T . \underline{y}$ ya que un escalar es invariante ante transposición.

Se deduce que el denominador de esta última expresión se reduce a: $2\left(\underline{x}^T . \underline{x} - \underline{y}^T . \underline{x}\right)$; por lo tanto resulta:

$$\left[\underline{\underline{I}} - \frac{2\left(\underline{x}-\underline{y}\right)\otimes\left(\underline{x}-\underline{y}\right)^T}{\left\|\underline{x}-\underline{y}\right\|_2^2}\right].\underline{x} = \underline{x} - \frac{2\left(\underline{x}^T . \underline{x} - \underline{y}^T . \underline{x}\right)}{2\left(\underline{x}^T . \underline{x} - \underline{y}^T . \underline{x}\right)}\left(\underline{x}-\underline{y}\right) = \underline{x} - \left(\underline{x}-\underline{y}\right) = \underline{y}$$

Con ayuda de este resultado podemos construir una secuencia de transformaciones de Householder $\underline{\underline{P}}_1$ , $\underline{\underline{P}}_2$ , $\underline{\underline{P}}_3 \cdots \underline{\underline{P}}_n$ tal que al ser aplicadas a la matriz $\underline{\underline{A}}$, una columna a la vez, la reduzcan a una matriz triangular superior:

$$\underline{\underline{P}}_n \cdots \underline{\underline{P}}_2 . \underline{\underline{P}}_1 . \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix} \tag{17}$$

Dado que cada $\underline{\underline{P}}_i$ es ortogonal, resulta:

$$\left(\underline{\underline{P}}_n \cdots \underline{\underline{P}}_3 . \underline{\underline{P}}_2 . \underline{\underline{P}}_1\right)^T . \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix} = \underline{\underline{P}}_1^{\,T} . \underline{\underline{P}}_2^{\,T} \cdots \underbrace{\underline{\underline{P}}_n^{\,T} . \underline{\underline{P}}_n}_{\underline{\underline{I}}} \cdots \underline{\underline{P}}_2 . \underline{\underline{P}}_1 . \underline{\underline{A}} = \underline{\underline{A}} \tag{18}$$

Luego, definimos $\underline{\underline{Q}} \equiv \left(\underline{\underline{P}}_n \cdots \underline{\underline{P}}_2 . \underline{\underline{P}}_1\right)^T$ tal que $\underline{\underline{A}} \equiv \underline{\underline{Q}} . \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix}$ con $\underline{\underline{Q}}^T . \underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{I}}$

Supongamos por el momento que hemos encontrado una matriz $\underline{\underline{Q}}$ tal que $\underline{\underline{Q}} \equiv \left(\underline{\underline{P}}_n \cdots \underline{\underline{P}}_2 . \underline{\underline{P}}_1\right)^T$. Si consideramos el SEAL $\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} = \underline{b}$ entonces, resulta:

$$\underline{\underline{Q}}^T . \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix} \tag{19}$$

$$\underline{\underline{Q}}^T . \underline{b} = \begin{pmatrix} \underline{c} \\ \underline{d} \end{pmatrix} \tag{20}$$

Esto es, separamos al vector $\underline{\underline{Q}}^T.\underline{b}$ en un vector $\underline{c}$ cuyo número de componentes es igual al número de filas de $\underline{\underline{R}}$ y un vector $\underline{d}$ cuyo número de componentes es igual al número de filas nulas. Planteamos el vector residuo: $\underline{r} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} - \underline{b}$ , de donde obtenemos:

$$\underline{\underline{Q}}^T . \underline{r} = \underline{\underline{Q}}^T \left(\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} - \underline{b}\right) = \left(\underline{\underline{Q}}^T . \underline{\underline{A}}\right) \cdot \underline{x} - \underline{\underline{Q}}^T . \underline{b} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix} \cdot \underline{x} - \begin{pmatrix} \underline{c} \\ \underline{d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \cdot \underline{x} - \underline{c} \\ -\underline{d} \end{pmatrix} \tag{21}$$

Dado que $\underline{\underline{Q}}^T$ es ortogonal,

$$\| \underline{r} \|_2^2 = \left\| \underline{\underline{Q}}^T . \underline{r} \right\|_2^2 = \left[ \left( \underline{\underline{R}} \cdot \underline{x} - \underline{c} \right)^T \quad -\left( \underline{d} \right)^T \right] . \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \cdot \underline{x} - \underline{c} \\ -\underline{d} \end{pmatrix} = \left\| \underline{\underline{R}} \cdot \underline{x} - \underline{c} \right\|_2^2 + \left\| \underline{d} \right\|_2^2 \qquad (22)$$

Planteamos ahora el problema de regresión:

$$\underset{\underline{x} \neq \underline{0}}{mín} \| \underline{r} \|_2^2 \qquad (23)$$

Esta última condición se verifica si:

$$\underline{\underline{R}} \cdot \underline{x} = \underline{c} \qquad (24)$$

O bien,

$$\underline{x} = \underline{\underline{R}}^{-1} \cdot \underline{c} \qquad (25)$$

con el vector residuo dado por:

$$\underline{r} = \underline{\underline{Q}} \cdot \begin{pmatrix} \underline{0} \\ -\underline{d} \end{pmatrix} \qquad (26)$$

El sistema de ecuaciones lineales $\underline{\underline{R}} \cdot \underline{x} = \underline{c}$ está mejor acondicionado que las ecuaciones normales $\left( \underline{\underline{A}}^T \cdot \underline{\underline{A}} \right) . \underline{x} = \underline{\underline{A}}^T . \underline{y}$ . En efecto, podemos escribir:

$$\underline{\underline{A}}^T . \underline{\underline{A}} = \underline{\underline{A}}^T . \underline{\underline{Q}} . \underline{\underline{Q}}^T . \underline{\underline{A}} = \left( \underline{\underline{Q}}^T . \underline{\underline{A}} \right)^T . \left( \underline{\underline{Q}}^T . \underline{\underline{A}} \right) = \underline{\underline{R}}^T . \underline{\underline{R}} \qquad (27)$$

Luego se cumple que:

$$K \left[ \left( \underline{\underline{A}}^T . \underline{\underline{A}} \right) \right] = K \left[ \left( \underline{\underline{R}}^T . \underline{\underline{R}} \right) \right] = K^2 \left( \underline{\underline{R}} \right) \qquad (28)$$

donde *K* representa al número de condición en norma 2, definido como la relación entre el mayor y el menor valor singular de la matriz,

$$K = \frac{|\sigma_1|}{|\sigma_n|} \qquad (29)$$

De aquí que el método se recomienda para resolver problemas de regresión lineal dado que:

$$K \left( \underline{\underline{R}} \right) = \sqrt{K \left( \underline{\underline{A}}^T . \underline{\underline{A}} \right)} \qquad (30)$$

Vamos a ver a continuación como construimos la secuencia de transformaciones $\underline{\underline{P}}_i$ con i =1,2, …,n que reducen la matriz $\underline{\underline{A}}$ a la forma triangular superior. Esto es, resta mostrar como generamos los $\underline{\underline{P}}_i$ .

Elegimos la primer transformación $\underline{\underline{P}}_1$ de manera que la primer columna de $\underline{\underline{A}}_2 = \underline{\underline{P}}_1 . \underline{\underline{A}}_1$ tenga ceros debajo de la diagonal. En esta etapa elegimos $\underline{\underline{A}}_1 = \underline{\underline{A}}$. Utilizamos la propiedad ya demostrada de los reflectores elementales; esto es, hacemos: $\underline{x}$ = $\underline{a}_1$ = 1er. columna de $\underline{\underline{A}}$ e

$$\underline{y} = \left( \pm \left\| \underline{a}_1 \right\|_2 ,0,0,\ldots,0 \right)^T \qquad (31)$$

De manera que $\left\| \underline{x} \right\|_2 = \left\| \underline{a}_1 \right\|_2 = \left\| \underline{y} \right\|_2$. Entonces, si definimos:

$$\hat{\underline{v}}_1 = \frac{\underline{a}_1 - \underline{y}}{\left\| \underline{a}_1 - \underline{y} \right\|_2} \qquad (32)$$

y

$$\underline{\underline{P}}_1 = \underline{\underline{I}} - 2\hat{\underline{v}}_1 \otimes \hat{\underline{v}}_1^T \qquad (33)$$

iniciamos el proceso, dado que la 1er. columna de $\underline{\underline{P}}_1 . \underline{\underline{A}}_1$ es:

$$\underline{\underline{P}}_1 . \underline{x} = \underline{\underline{P}}_1 . \underline{a}_1 = \underline{y} \qquad (34)$$

Por motivos computacionales elegimos que el signo de la componente no nula de $\underline{y}$ sea igual a –signo ($a_{11}$) (de $\underline{\underline{A}}_1$ ).

El problema surge con $\underline{\underline{P}}_2$. Debemos elegir $\underline{\underline{P}}_2$ de manera que los elementos subdiagonales de la segunda columna de $\underline{\underline{A}}_3 = \underline{\underline{P}}_2 . \underline{\underline{A}}_2$ se anulen, al mismo tiempo de asegurarse que la 1er. columna de $\underline{\underline{A}}_2$ permanezca inalterada.

Para este propósito observemos que si tomamos $\hat{\underline{v}}_2$ de la forma:

$$\hat{\underline{v}}_2 = \left( 0, v_2, v_3, \ldots, v_m \right)^T \qquad (35)$$

Entonces, el correspondiente reflector $\underline{\underline{P}}_2$ adopta la forma:

$$\underline{\underline{P}}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & x & x & \cdots & x \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & x & x & \cdots & x \end{pmatrix}$$

y $\underline{\underline{P}}_2 . \underline{\underline{A}}_2$ tendrá las mismas 1era. fila y primera columna de $\underline{\underline{A}}_2$. De aquí que para obtener $\underline{\underline{P}}_2$ debemos tomar: $\underline{x} = \underline{a}_2$ (2da. columna de $\underline{\underline{A}}_2$ ) e:

$$\underline{y} = \left( a_{12}, \pm\sqrt{\left\| \underline{a}_2 \right\|_2^2 - a_{12}^2}, 0,0,\ldots,0 \right)^T \qquad (36)$$

De manera que:

$$\hat{\underline{v}}_2 = \frac{\underline{a}_2 - \underline{y}}{\left\| \underline{a}_2 - \underline{y} \right\|_2} \qquad (37)$$

con

$$\underline{\underline{P}}_2 = \underline{\underline{I}} - 2\hat{\underline{v}}_2 \otimes \hat{\underline{v}}_2^T \qquad (38)$$

Por motivos computacionales elegimos que el signo de la 2da. componente no nula de $\underline{y}$ sea igual a –signo ($a_{22}$) (de $\underline{\underline{A}}_2$ ).

En la etapa k-ésima tomamos: $\underline{x} = \underline{a}_k$ (k-ésima columna de $\underline{\underline{A}}_k$ ) e

$$\underline{y} = \left( a_{1k}, a_{2k}, ..., a_{k-1,k}, \pm\sqrt{\|\underline{a}_k\|_2^2 - \sum_{i=1}^{k-1} a_{ik}^2}, 0, 0, \ldots, 0 \right)^T \qquad (39)$$

De modo que:

$$\hat{\underline{v}}_k = \frac{\underline{a}_k - \underline{y}}{\|\underline{a}_k - \underline{y}\|_2} \qquad (40)$$

con

$$\underline{\underline{P}}_k = \underline{\underline{I}} - 2\hat{\underline{v}}_k \otimes \hat{\underline{v}}_k^T \qquad (41)$$

En cada caso $\underline{a}_k$ representa la columna k-ésima de la matriz $\underline{\underline{A}}_k$ , debiéndose elegir el signo de la componente k-ésima de $\underline{y}$ igual a –sign($a_{kk}$) (de $\underline{\underline{A}}_k$ ). Después de n-pasos u etapas, tenemos:

$$\underline{\underline{A}}_{n+1} = \underline{\underline{P}}_n \cdots \underline{\underline{P}}_2 . \underline{\underline{P}}_1 . \underline{\underline{A}}_1 = \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{0}} \end{pmatrix} \qquad (42)$$

**Problemas Degenerados**

¿Qué sucede si el problema está subdeterminado? En este caso, la matriz $\underline{\underline{R}}$ no es de rango completo.

***Algunas definiciones***

1. ***Rango de una matriz:*** Dada una matriz cualquiera $\underline{\underline{A}}$ de orden (mxn), se denomina rango de la matriz $\underline{\underline{A}}$ y se denota $rg(\underline{\underline{A}})$ al máximo número de vectores columna (fila) linealmente independientes. Además, $rg_f(\underline{\underline{A}}) = rg_c(\underline{\underline{A}})$.
2. ***Definición alternativa de rango de una matriz:*** Orden del determinante no nulo de máximo orden que se puede construir con las filas y las columnas de $\underline{\underline{A}}$.

***Clasificación de las matrices en función del rango***

Sea $\underline{\underline{A}} \in M^{(mxn)}$ entonces,

a) Si $m \neq n$ y $rg(\underline{\underline{A}}) = mín(m.n)$ diremos que la matriz es de *rango completo*; en caso contrario diremos que $\underline{\underline{A}}$ no es de rango completo.

b) Si $m = n$ entonces:

b.1) Si $rg(\underline{\underline{A}}) = n$ diremos que $\underline{\underline{A}}$ es una *matriz no singular* o *regular*.

b.2) Si $rg(\underline{\underline{A}}) < n$ diremos que $\underline{\underline{A}}$ es una *matriz singular*.

Los problemas degenerados en regresión lineal surgen si las columnas de la matriz de las funciones de modelización son linealmente dependientes. Para estos problemas habrá un infinito número de modos de aproximar los datos con el mismo residuo (mínimo).

***Ejemplo:*** Sea el modelo $b(t) = x_1 \cdot (1) + x_2 \cdot (t) + x_3 \cdot (2t+1)$. Supongamos que se dispone de N datos experimentales (N > 3 = nro. de parámetros), por consiguiente éstos deberán satisfacer al modelo propuesto, esto es:

$$\begin{aligned} b(t_1) &= x_1 \cdot (1) + x_2 \cdot (t_1) + x_3 \cdot (2t_1 + 1) \\ b(t_2) &= x_1 \cdot (1) + x_2 \cdot (t_2) + x_3 \cdot (2t_2 + 1) \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ b(t_N) &= x_1 \cdot (1) + x_2 \cdot (t_N) + x_3 \cdot (2t_N + 1) \end{aligned} \tag{43}$$

En forma matricial,

$$\underbrace{\begin{pmatrix} b(t_1) \\ b(t_2) \\ \vdots \\ b(t_N) \end{pmatrix}}_{\underline{b}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & t_1 & 2t_1 + 1 \\ 1 & t_2 & 2t_2 + 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & t_N & 2t_N + 1 \end{pmatrix}}_{\underline{\underline{A}}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}}_{\underline{x}} \tag{44}$$

Entonces, si $\underline{x}^* = (x_1^*, x_2^*, x_3^*)$ es solución del problema de regresión, también lo es:

$$\underline{x} = \underline{x}^* + \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \forall \alpha \in R \tag{45}$$

En efecto,

$$\underline{\underline{A}}.\underline{x} - \underline{b} = \underline{\underline{A}}.\left[ \underline{x}^* + \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \right] - \underline{b} = \underline{\underline{A}}.\underline{x}^* + \underbrace{\underline{\underline{A}}.\begin{pmatrix} \alpha \\ 2\alpha \\ -\alpha \end{pmatrix}}_{\equiv \underline{0}} - \underline{b} = \underline{\underline{A}}.\underline{x}^* - \underline{b} \tag{46}$$

Concluimos que $\underline{x}^*$ y $\underline{x}$ suministran el mismo residuo.

El límite entre la degeneración y la no-degeneración puede estar desdibujado por los errores de redondeo. Por ejemplo, supongamos que tenemos el siguiente SEAL:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 10^{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \; con\ k>1$$

Este SEAL tiene como solución:

$$x_2 = 10^k \;\; ; \;\; x_1 = \frac{1-10^k}{1} \approx -10^k$$

Ahora supongamos que $k >> 1$, siendo $a_{22}$ distinto de cero debido a errores de redondeo (en realidad debería considerarse 0). En esta situación preferimos ajustar los datos con $x_2 = 0$ y $x_1 = 1$, puesto que en este caso $\|\underline{x}\|_2 = 1$ en lugar de $\sqrt{2}10^k$

Concluimos que en estos casos lo que se estila es adoptar para el modelo parámetros pequeños, esto es, para problemas degenerados deseamos que el vector de parámetros de modelización tenga la longitud más corta.

Algunas veces resulta difícil determinar por simple observación cuán cercana se halla una matriz de la degeneración. Consideremos la matriz:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 & \cdots & -1 \\ 0 & 1 & -1 & -1 & \cdots & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & \cdots & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

El determinante de esta matriz es igual a 1. Si $a_{n1} = -2^{-(n-2)}$ la matriz es singular. A pesar que $\underline{\underline{A}}$ es de forma triangular superior, aún podemos efectuarle una factorización QR, pero en este caso aplicando pivoteo de columna.

Para ello, elegimos la columna de mayor norma, la movemos a la columna 1 y la reducimos (mediante transformaciones de Householder). Luego seleccionamos la próxima columna más grande de la submatriz restante [nx(n-1)] y la movemos a la columna 2, y así sucesivamente. Este procedimiento nos conduce a la siguiente matriz:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 2.24 & 0.89 & 0.45 & 0 & -0.45 \\ 0 & 1.79 & 0.34 & 0 & -0.34 \\ 0 & 0 & -1.64 & 0 & 0.42 \\ 0 & 0 & 0 & -1.4 & 0.71 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.108 \end{pmatrix}$$

Nótese que el último elemento de la diagonal es un orden de magnitud más pequeño que los otros elementos diagonales. Esto se debe a que la matriz $\underline{\underline{A}}$ se halla próxima a la singularidad. Lo que hicimos es equivalente a efectuar la factorización QR de la matriz $\underline{\underline{A}}$ con pivoteo de columna, esto es, $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{R}}.\underline{\underline{P}}^T$ donde $\underline{\underline{P}}$ representa a una matriz de permutación de columnas.

Por otra parte, si $\underline{\underline{A}}$ es singular o no es de *rango completo*, $\underline{\underline{R}}$ es de la forma:

$$\begin{pmatrix} x & x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

El número de filas no nulas de $\underline{\underline{R}}$ es el rango de $\underline{\underline{A}}$.

Supongamos ahora que en la factorización QR con pivoteo de columna de la matriz $\underline{\underline{A}}$ representamos la estructura de la matriz $\underline{\underline{R}}$ de arriba de la siguiente manera:

$$\underline{\underline{R}} = \begin{pmatrix} x & x & x & x & x & x \\ 0 & x & x & x & x & x \\ 0 & 0 & x & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & x & x & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{R_1}} & \underline{\underline{R_2}} \\ \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{0}} \end{pmatrix} \qquad (47)$$

donde $\underline{\underline{R}}_1$ representa a una matriz triangular superior y $\underline{\underline{R}}_2$ a una matriz rectangular no nula.

La factorización con pivoteo de columna se puede utilizar para resolver el problema de mínimos cuadrados, así:

$$\min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{A}}.\underline{x} - \underline{b} \right\|_2 = \min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{Q}}^T.\left( \underline{\underline{A}}.\underline{x} - \underline{b} \right) \right\|_2 = \min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{Q}}^T.\left( \underline{\underline{Q}}.\underline{\underline{R}}.\underline{\underline{P}}^T \right).\underline{x} - \underline{\underline{Q}}^T.\underline{b} \right\|_2 = \min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{R}}.\underline{\underline{P}}^T.\underline{x} - \underline{\underline{Q}}^T.\underline{b} \right\|_2 \qquad (48)$$

Definimos un nuevo vector de parámetros:

$$\underline{y} = \underline{\underline{P}}^T.\underline{x} \qquad (49)$$

y un nuevo vector de datos,

$$\underline{c} = \underline{\underline{Q}}^T.\underline{b} \qquad (50)$$

Particionamos a los vectores $\underline{y}$ y $\underline{c}$ en dos partes, de esta manera:

$$\underline{y} = \begin{pmatrix} \underline{y}_1 \\ \underline{y}_2 \end{pmatrix} \;;\; \underline{c} = \begin{pmatrix} \underline{c}_1 \\ \underline{c}_2 \end{pmatrix}$$

donde el número de componentes de $\underline{y}_1$ y $\underline{c}_1$ es igual al número de filas no nulas de $\underline{\underline{R}}$.

Por consiguiente, resolver el problema de regresión:

$$\min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{A}}.\underline{x} - \underline{b} \right\|_2$$

o

$$\min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{A}}.\underline{x} - \underline{b} \right\|_2^2$$

es equivalente a resolver,

$$\min_{\underline{y}\neq\underline{0}}\left\|\begin{pmatrix}\underline{\underline{R}}_1 & \underline{\underline{R}}_2\\ \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{0}}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\underline{y}_1\\ \underline{y}_2\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}\underline{c}_1\\ \underline{c}_2\end{pmatrix}\right\|_2^2=\min_{\underline{y}\neq\underline{0}}\left[\left\|\underline{\underline{R}}_1\cdot\underline{y}_1+\underline{\underline{R}}_2\cdot\underline{y}_2-\underline{c}_1\right\|_2^2+\left\|\underline{c}_2\right\|_2^2\right] \tag{51}$$

El segundo término no puede ser afectado por los parámetros $\underline{y}$. Sin embargo el primer término puede hacerse cero de infinitas maneras. En efecto, si fijamos $\underline{y}_2$ en forma arbitraria, entonces $\underline{y}_1$ se obtiene resolviendo el siguiente SEAL:

$$\underline{\underline{R}}_1\cdot\underline{y}_1=\underline{c}_1-\underline{\underline{R}}_2\cdot\underline{y}_2 \tag{52}$$

En particular, si eligiésemos $\underline{y}_2\equiv\underline{0}$ el sistema anterior se reduce a:

$$\underline{\underline{R}}_1\cdot\underline{y}_1=\underline{c}_1 \tag{53}$$

que resolvemos por sustitución hacia atrás.

Pero todavía el problema no está resuelto. En efecto, tenemos que:

$$\underline{y}=\begin{pmatrix}\underline{y}_1\\ \underline{0}\end{pmatrix}$$

Luego, de la definición del vector $\underline{y}$ resulta:

$$\underline{x}=\underline{\underline{P}}\cdot\underline{y} \tag{54}$$

ya que la inversa de $\underline{\underline{P}}^T$ es $\underline{\underline{P}}$ por ser matrices de permutación (en este caso de columnas). Esto es, reordenamos variables para obtener finalmente los parámetros del modelo siendo $\left\|\underline{c}_2\right\|$ el residuo.

Una forma alternativa de resolver problemas de regresión lineal degenerados es plantear la descomposición en valores singulares de la matriz $\underline{\underline{A}}\in M^{(mxn)}$ con m>n. Operamos sobre $\underline{\underline{A}}$ de manera que:

$$\underset{m\times n}{\underline{\underline{A}}}=\underset{\substack{ortogonal\\ m\times m}}{\underline{\underline{U}}}\cdot\overset{\substack{diagonal\\ m\times n}}{\underline{\underline{\Sigma}}}\cdot\underset{\substack{ortogonal\\ n\times n}}{\underline{\underline{V}}^T} \tag{55}$$

donde $\underline{\underline{U}}$ y $\underline{\underline{V}}$ representan matrices ortogonales, mientras que $\underline{\underline{\Sigma}}$ es una matriz diagonal cuyos elementos diagonales representan a los valores singulares de la descomposición. Mediante la utilización de pivoteo de columna, los elementos de $\underline{\underline{\Sigma}}$ se pueden ordenar de manera decreciente, así, $|\sigma_1|\geq|\sigma_2|\geq|\sigma_3|\geq\cdots\geq|\sigma_n|$. Si $\sigma_n=0$ luego $\underline{\underline{A}}$ no es de rango total $(m>n)$.

La descomposición tiene múltiples aplicaciones, una de ellas a la resolución de problemas de regresión y ajuste de datos:

$$\min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{A}}.\underline{x}-\underline{b} \right\|_2 = \min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{U}}.\underline{\underline{\Sigma}}.\underline{\underline{V}}^T.\underline{x}-\underline{b} \right\|_2 = \min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{\Sigma}}.\underline{\underline{V}}^T.\underline{x}-\underline{\underline{U}}^T.\underline{b} \right\|_2 \tag{56}$$

Definamos dos nuevos vectores: $\underline{z} \equiv \underline{\underline{V}}^T.\underline{x}$ y $\underline{d} \equiv \underline{\underline{U}}^T.\underline{b}$ . Por lo tanto, resulta:

$$\min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{A}}.\underline{x}-\underline{b} \right\|_2 = \min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{\Sigma}}.\underline{z}-\underline{d} \right\|_2 \tag{57}$$

En forma equivalente,

$$\min_{\underline{x}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{A}}.\underline{x}-\underline{b} \right\|_2^2 = \min_{\underline{z}\neq\underline{0}} \left\| \underline{\underline{\Sigma}}.\underline{z}-\underline{d} \right\|_2^2 \tag{58}$$

Si separamos al vector $\underline{d}$ en dos partes, $\underline{d}_1$ y $\underline{d}_2$, de manera que el número de componentes del primero sea igual al número de filas no nulas de $\underline{\underline{\Sigma}}$ y el número de componentes de $\underline{d}_2$ igual al número de filas nulas, luego resulta:

$$\min_{\underline{z}\neq\underline{0}} \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \end{pmatrix} . \underline{z} - \begin{pmatrix} \underline{d}_1 \\ \underline{d}_2 \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \min_{\underline{z}\neq\underline{0}} \left\{ \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \end{pmatrix} . \underline{z} - \underline{d}_1 \right\|_2^2 + \left\| \underline{d}_2 \right\|_2^2 \right\} \tag{59}$$

Si $\sigma_n \neq 0$ estamos ante un problema no degenerado ya que resolver el problema anterior equivale a resolver el SEAL:

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \end{pmatrix} . \underline{z} = \underline{d}_1 \tag{60}$$

de donde obtenemos: $z_i = \dfrac{d_i}{\sigma_i}$ con i=1,2,…n y finalmente el vector de parámetros $\underline{x}$ haciendo:

$$\underline{\underline{V}}.\underline{\underline{V}}^T.\underline{x} \equiv \underline{x} = \underline{\underline{V}}.\underline{z} \tag{61}$$

ya que $\underline{\underline{V}}$ es una matriz ortogonal. El residuo en este caso es:

$$\left\| r \right\|_2^2 = \left\| \underline{d}_2 \right\|_2^2 = \sum_{i=n+1}^{m} d_i^{\,2} \tag{62}$$

Si $\sigma_n = 0$ estamos en presencia de un problema degenerado. En efecto, Si $\sigma_n \approx 0$ o del orden del épsilon de la computadora podríamos considerarlo cero dado que no interviene en el cálculo de $\underline{x}$ . Esto es

$$z_i = \begin{cases} \dfrac{d_i}{\sigma_i} & si\ \sigma_i > \varepsilon \\ 0 & si\ \sigma_i < \varepsilon \end{cases} \tag{63}$$

Esta forma de determinar los parámetros tiene la propiedad que entre el conjunto de vectores $\underline{x}^*$ que minimizan el residuo $\left\|\underline{\underline{A}}.\underline{x}-\underline{b}\right\|_2$ , éste tendrá la mínima norma, esto es:

$$\left\|\underline{x}_{SVD}\right\|_2 \leq \left\|\underline{x}\right\|_2 \tag{64}$$