Ajuste de datos con mínimos cuadrados (descripción de la tarea)

Egor Maximenko
http://esfm.egormaximenko.com

Instituto Politécnico Nacional, ESFM, México

11 de abril de 2017

Idea de la tarea

Programar el ajuste polinomial y trigonométrico de datos
con el método de mínimos cuadrados
basándose en la descomposición QR.

A continuación se muestra un ejemplo de resultados (tres gráficas)
y se describen las funciones que se recomienda programar.
En los fragmentos de códigos se usa la sintaxis de GNU Octave.

Resultados

Al final del trabajo, enviar por correo los siguientes resultados:

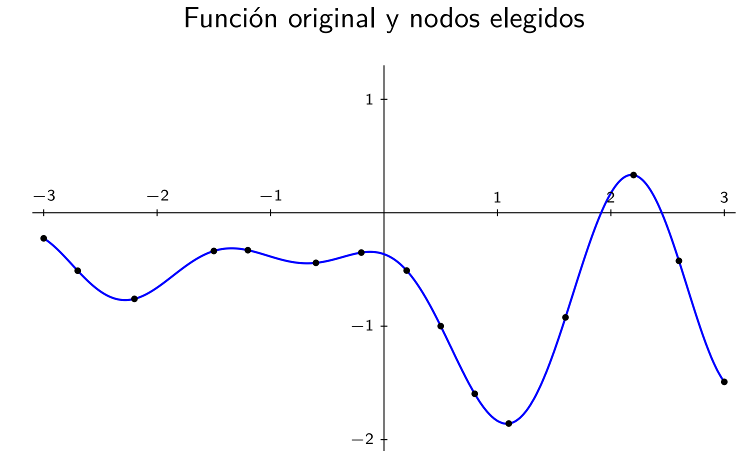
- Un archivo PDF con tres gráficas y sus descripciones muy breves.
- Los programas.

Se recomienda construir las gráficas con el siguiente método:

- En el lenguaje de programación elegido calcular y guardar los nodos, la tabla de valores de la función original (en muchos puntos), la tabla de valores del polinomio algebraico y la tabla de valores del polinomio trigonométrico.
- Usar el comando `\draw plot` del paquete TikZ de LaTeX para convertir las tablas de valores en gráficas.

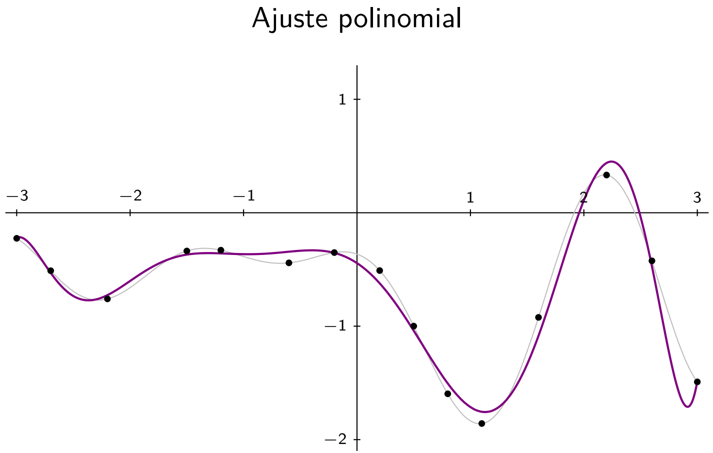
Este método permite usar en las gráficas el mismo estilo (en particular, las mismas fuentes) que en todo el documento, escribir bien las fórmulas, ajustar el estilo de los nodos, etc.

Ejemplo de resultados



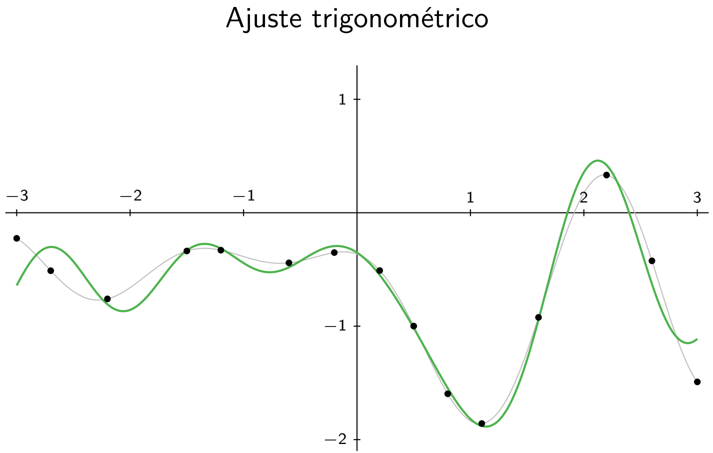

```
f(x) = 1.5 * cos(log(x+5)) + 0.04 * x .^ 3 - 0.5 * sqrt(2 + sin(2*x)) + (0.3*x+0.4) .* cos(3*x);

x = [-3; -2.7; -2.2; -1.5; -1.2; -0.6; -0.2; 0.2; 0.5; 0.8; 1.1; 1.6; 2.2; 2.6; 3.0]
```

Ejemplo de resultados



$$P(x) = -0.4441 - 0.6611x - 1.1244x^2 - 0.2418x^3 + 0.6300x^4$$
$$+ 0.2790x^5 - 0.1061x^6 - 0.0528x^7 + 0.0055x^8 + 0.0028x^9$$

Ejemplo de resultados



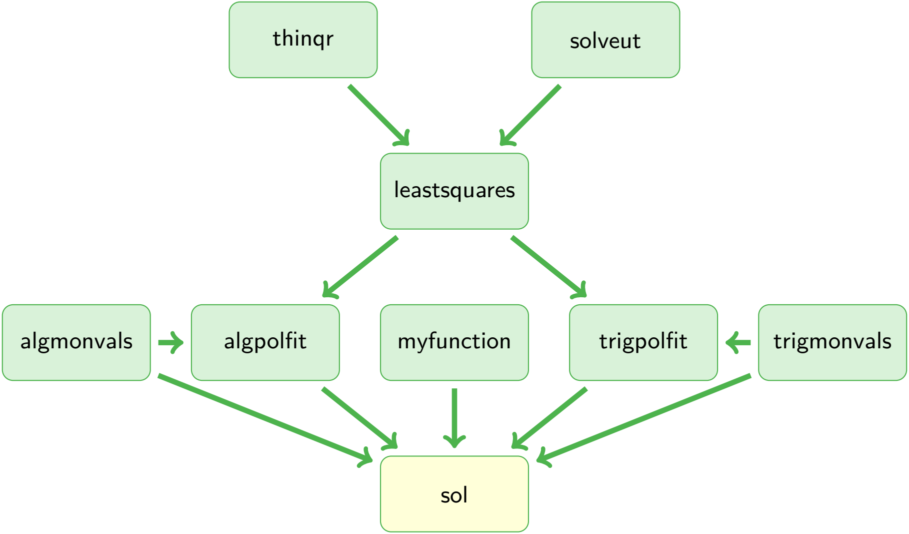
$$T(x) = -0.6574 - 0.1321\cos(x) + 0.0447\cos(2x) + 0.4034\cos(3x) - 0.0205\cos(4x) + 0.0104\cos(5x)$$
$$- 0.2083\sin(x) - 0.4359\sin(2x) - 0.0532\sin(3x) + 0.3609\sin(4x) - 0.1723\sin(5x)$$

Sugerencias para construir la función original

Hay que elegir una función buena, pero no trivial.

- El dominio debe ser un intervalo de longitud menor que 2π.
  Por ejemplo, puede ser $[-3, 1]$ o $[1, 6]$.
- Las abscisas de los nodos no deben ser todas equidistantes.
- La función debe ser suave en todo el dominio.
- La función debe combinar (en el sentido de composiciones y combinaciones lineales) varios tipos de funciones elementales.
- La diferencia entre el valor máximo y el valor mínimo de la función debe ser entre 3 y 5, para que las gráficas se vean bien con las mismas escalas de abscisas y ordenadas.
- La función debe tener de 4 a 8 mínimos y máximos locales dentro del dominio.
- El valor en el extremo izquierdo no debe ser muy lejano del valor en el extremo derecho, para que tenga sentido el ajuste trigonométrico.

Funciones por programar



Varios métodos para programar la función thinqr

Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ con $n \geq m$, y $\mathrm{r}(A) = m$,
hay que construir matrices $Q \in \mathbb{R}^{n \times m}$ y $R \in \mathbb{R}^{m \times m}$ tales que:

- $A = QR$;
- las columnas de Q forman un lista ortonormal, esto es, $Q^\top Q = I_m$;
- R es una matriz cuadrada triangular superior: $R_{j,k} = 0$ si $j > k$.

En este texto no se explica cómo programar la función thinqr.
Solamente mencionamos varios caminos posibles:

- Algoritmo modificado de Gram–Schmidt.
- Reflexiones de Householder.
- Rotaciones de Givens.

Notemos que las matrices Q y R no se determinan de manera única.
Varios métodos y varios convenios pueden dar resultados diferentes.

Función thinqr

$A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ → $Q \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $R \in \mathbb{R}^{m \times m}$

$n \geq m$

tales que

$$A = QR,$$
$$Q^\top Q = I_m,$$
$$R_{j,k} = 0 \text{ si } j > k$$

```
function [Q, R] = thinqr(A),
    ...
endfunction
```

Función thinqr

comprobación

$$Q = \begin{bmatrix} 0.28 & 0.42 & -0.84 \\ 0.55 & 0.43 & 0.52 \\ 0.64 & 0.02 & 0.03 \\ 0.46 & -0.80 & -0.16 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 0.3 & 0.4 & 0.1 \\ 0.6 & 0.7 & 0.7 \\ 0.7 & 0.7 & 0.8 \\ 0.5 & 0.3 & 0.7 \end{bmatrix}$$

$$R = \begin{bmatrix} 1.09 & 1.08 & 1.25 \\ 0 & 0.24 & -0.20 \\ 0 & 0 & 0.19 \end{bmatrix}$$

```
A = rand(4, 3);
[Q, R] = thinqr(A)
norm(Q * R - A)
norm(Q' * Q - eye(3))
```

Función solveut

$U_{j,j} \neq 0$

$A_{j,k} = 0$ si $j > k$

$U \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$b \in \mathbb{R}^{n}$

$x \in \mathbb{R}^{n}$

tal que

$Ux = b$

Se recomenda realizar la función con un ciclo
usando operaciones lineales (axpy) con fragmentos de columnas.

Función solveut

comprobación

$$U = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 2 \\ 0 & -2 & 5 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 4 \\ 19 \\ -5 \end{bmatrix}$$

$$x = \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \\ 5 \end{bmatrix}$$

```
U = [3 -1 2; 0 -2 5; 0 0 -1]
b = [4; 19; -5]
x = solveut(U, b)
norm(U * x - b)
```

Función leastsquares

$n \geq m$

$\mathrm{r}(A) = n$

$A \in \mathbb{R}^{n \times m}$

$b \in \mathbb{R}^{n}$

$x \in \mathbb{R}^{m}$

$\|Ax - b\| \to$ min, i.e.,

$$\forall y \in \mathbb{R}^m$$

$$\|Ax - b\| \leq \|Ay - b\|$$

```
function x = leastsquares(A, b),
   [Q, R] = thinqr(A);
   x = solveut(..., ...);
endfunction
```

Función leastsquares

comprobación

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -3 & -1 \\ -1 & -3 & -4 \\ 2 & 4 & 3 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$x = \begin{bmatrix} 1.05612 \\ 0.69924 \\ -1.87516 \end{bmatrix}$$

```
A = [2 -3 -1; -1 -3 -4; 2 4 3; 0 1 -1]
b = [2; 4; -1; 3]
x = leastsquares(A, b)
```

Función algmonvals (matriz de Vandermonde)

$x \in \mathbb{R}^n$

$m \in \{1, 2, \ldots\}$

$\longrightarrow$ $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$

tal que

$$A_{j,k} = x_j^{k-1}$$

Por ejemplo, para $x \in \mathbb{R}^2$ y $m = 4$ la función debe devolver la matriz

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \end{bmatrix}.$$

Función algmonvals

comprobación

$$x = \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$m = 4$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 9 & 27 \\ 1 & -2 & 4 & -8 \end{bmatrix}$$

Función trigmonvals

$x \in \mathbb{R}^n$

$p \in \{1, 2, \ldots\}$

$A \in \mathbb{R}^{n\times(2p+1)}$

tal que

$$\begin{aligned} A_{j,1} &= 1, \\ A_{j,k+1} &= \cos(kx_j), \\ A_{j,p+k+1} &= \sin(kx_j) \\ (1 \leq\ &k \leq p) \end{aligned}$$

Por ejemplo, si $x \in \mathbb{R}^3$ y $p = 2$, entonces la matriz A debe ser

$$A = \begin{bmatrix} 1 & \cos(x_1) & \cos(2x_1) & \sin(x_1) & \sin(2x_1) \\ 1 & \cos(x_2) & \cos(2x_2) & \sin(x_2) & \sin(2x_2) \\ 1 & \cos(x_3) & \cos(2x_3) & \sin(x_3) & \sin(2x_3) \end{bmatrix}.$$

Función trigmonvals

sugerencias

Se recomienda programar la función sin ciclos.

Tarea creativa: sin usar ciclos formar la matriz $M = \left[k\, x_j\right]_{j,k=1}^{n,p}$.
Por ejemplo, si $x \in \mathbb{R}^2$ y $p = 3$, la matriz M debe ser

$$M = \begin{bmatrix} x_1 & 2x_1 & 3x_1 \\ x_2 & 2x_2 & 3x_2 \end{bmatrix}.$$

Luego aplicar cos y sin a esta matriz y juntar los resultados:

```
function A = trigmonvals(x, p),
   M = ...;
   A = [ones(size(x)), cos(M), sin(M)];
endfunction
```

Función trigmonvals

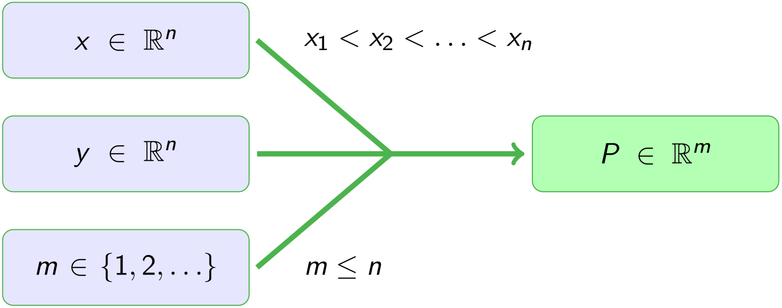
comprobación

$$x = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.5 \\ 0.6 \end{bmatrix}$$

$$p = 2$$

$$A = \begin{bmatrix} 1.00000 & 0.98007 & 0.92106 & 0.19867 & 0.38942 \\ 1.00000 & 0.87758 & 0.54030 & 0.47943 & 0.84147 \\ 1.00000 & 0.82534 & 0.36236 & 0.56464 & 0.93204 \end{bmatrix}$$

Función algpolfit



El vector P se trata como el vector de los coeficientes de un polinomio. Hay que minimizar la expresión

$$\sum_{j=1}^{n} \left| \sum_{k=1}^{m} P_k x_j^{k-1} - y_j \right|^2 .$$

Función algpolfit

Sugerencia

El problema del ajuste polinomial requiere minimizar la expresión

$$\sum_{j=1}^{n} \left| \sum_{k=1}^{m} P_k x_j^{k-1} - y_j \right|^2 .$$

En el lenguaje matricial, se minimiza la norma euclidiana de la diferencia

$$AP - y,$$

donde la matriz de Vandermonde $A = \left[x_j^{k-1}\right]_{j,k=1}^{n,m}$
se construye con la función `algmonvals`.

Es el problema de mínimos cuadrados (para el vector incógnito P).

Función algpolfit

comprobación

$$x = \begin{bmatrix} -5 \\ -3 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

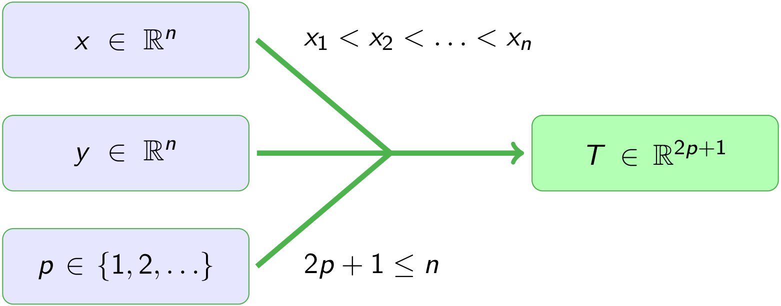
$$y = \begin{bmatrix} 2 \\ -3 \\ -4 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$m = 3$$

$$P = \begin{bmatrix} -5.88073 \\ 0.34569 \\ 0.39286 \end{bmatrix}$$

```
x = [-5 -3 2; 4]; y = [2; -3; -4; 2]; m = 3;
P = algpolfit(x, y, m)
```

Función trigpolfit



Las componentes de T se tratan como los coeficientes de un polinomio trigonométrico. Hay que minimizar la expresión

$$\sum_{j=1}^{n} \left| T_1 + \sum_{k=1}^{p} T_{1+k} \cos(k\, x_j) + \sum_{k=1}^{p} T_{p+1+k} \sin(k\, x_j) - y_j \right|^2 .$$

Función trigpolfit

comprobación

$$x = [-9, -7, -1, 3, 4, 5]^\top$$

$$y = [0.5, -0.6, 0.4, 0.1, 0.1, 0.5]^\top$$

$$p = 2$$

$$T = \begin{bmatrix} -4.4966 \\ -3.4991 \\ 1.4355 \\ -6.2613 \\ -2.2661 \end{bmatrix}$$

```
x = [-9; -7; -1; 3; 4; 5];
y = [0.5; -0.6; 0.4; 0.1; 0.1; 0.5]; p = 2;
T = trigpolfit(x, y, p)
```

Función myfunction

Se recomienda construir una función elemental que en el intervalo $[-3, 3]$ tenga varios máximos y mínimos y no tome valores grandes.

```
function y = myfunction(x),
   y = 1.5 * cos(log(x + 5)) + 0.04 * x .^ 3;
   y = y - 0.5 * sqrt(2 + sin(2 * x));
   y = y + (0.3 * x + 0.4) .* cos(3 * x);
endfunction
```

La función es vectorizada: dado un arreglo,
la función construirá el arreglo de los valores correspondientes.
Pongan atención a las operaciones `.^` y `.*`.

Script sol, inicio

La función `[] = sol()` no tiene argumentos y no regresa resultados.
Esta función utiliza varias funciones anteriores
y guarda varios archivos de texto con tablas de datos.

Primero elegimos los nodos y construimos los polinomios de ajuste:

```
x = [-3.0; -2.7; -2.2; -1.5; -1.2; -0.6; -0.2; 0.2;
     0.5; 0.8; 1.1; 1.6; 2.2; 2.6; 3.0];
fx = myfunction(x);
P = algpolfit(x, fx, 9);
T = trigpolfit(x, fx, 4);
```

Calculamos los valores de estas funciones en muchos puntos para poder dibujar sus gráficas:

```
xg = linspace(-3, 3, 501)'; fxg = myfunction(xg);
Pxg = algmonvals(xg, d) * P;
Txg = trigmonvals(xg, p) * T;
```

Script sol, final

Hay varias maneras de guardar gráficas o tablas de valores.
Por ejemplo, las tablas de valores se pueden guardar así:

```
filenodes = fopen('nodes.table', 'w');
fprintf(filenodes, '%6.4g %6.4g\n', [x fx]');
fclose(filenodes);
...# de manera similar guardar [xg fxg]' en 'fg.table'
...# de manera similar guardar [xg Pxg]' y [xg Txg]'
```

Luego hacer referencias a estas tablas en LaTeX + TikZ:

```
\draw[thick,blue] plot[smooth] file {fg.table};
\draw plot[only marks,mark=*,mark size=0.7,
   mark options={color=black}] file {nodes.table};
```

Problemas teóricos

Sirven para demostrar la existencia y unicidad
del ajuste polinomial y trigonométrico.

Se pueden resolver después de entregar la solución de la tarea práctica.

Problema teórico: fórmula para el determinante de la matriz de Vandermonde

Para cualesquiera números $x_1, \ldots, x_n$ denotemos por $V_m(x_1, \ldots, x_n)$ a la matriz de Vandermonde:

$$V_m(x_1, \ldots, x_n) = \left[x_j^{k-1} \right]_{j,k=1}^{n,m}.$$

Demostrar por inducción que

$$\det V_n(x_1, \ldots, x_n) = \prod_{\substack{p,q \in \{1,\ldots,n\} \\ p<q}} (x_q - x_p).$$

Hacer una conclusión sobre la dependencia lineal
de los renglones de la matriz $V_n(x_1, \ldots, x_n)$
en el caso si los números $x_1, \ldots, x_n$ son diferentes a pares.

Problema teórico: el rango de la matriz de valores de monomios algebraicos

Demostrar que si $x_1, \ldots, x_n$ son diferentes a pares y $m \leq n$, entonces la matriz construida por `algmonvals` tiene rango m. Recordamos que para $n = 5$ y $m = 4$ se trata de la matriz

$$V_4(x_1, \ldots, x_5) = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 \\ 1 & x_5 & x_5^2 & x_5^3 \end{bmatrix}.$$

Problema teórico: determinante de una matriz formada por los valores de funciones trigonométricas

Sean $x_1, \ldots, x_n$ algunos números, donde $n = 2p + 1$.
Denotemos por $T_p(x_1, \ldots, x_n)$ a la matriz cuyo j-ésimo renglón es

$$1, \quad \cos(x_j),\ \ldots,\ \cos(px_j), \quad \sin(x_j),\ \ldots,\ \sin(px_j).$$

Por ejemplo,

$$T_2(x_1, \ldots, x_5) = \begin{bmatrix} 1 & \cos(x_1) & \cos(2x_1) & \sin(x_1) & \sin(2x_1) \\ 1 & \cos(x_2) & \cos(2x_2) & \sin(x_2) & \sin(2x_2) \\ 1 & \cos(x_3) & \cos(2x_3) & \sin(x_3) & \sin(2x_3) \\ 1 & \cos(x_4) & \cos(2x_4) & \sin(x_4) & \sin(2x_4) \\ 1 & \cos(x_5) & \cos(2x_5) & \sin(x_5) & \sin(2x_5) \end{bmatrix}.$$

Deducir una fórmula para $\det T_p(x_1, \ldots, x_m)$.
Sugerencias: operaciones elementales por columnas,
fórmulas de Euler, determinante de Vandermonde.

Problema teórico: el rango de la matriz de valores de monomios trigonométricos

Demostrar que si $x_1, \ldots, x_n$ son diferentes a pares y $2p + 1 \leq n$, entonces la matriz construida por `trigmonvals` tiene rango $2p + 1$. Recordamos que para $n = 6$ y $p = 2$ se trata de la matriz

$$\begin{bmatrix} 1 & \cos(x_1) & \cos(2x_1) & \sin(x_1) & \sin(2x_1) \\ 1 & \cos(x_2) & \cos(2x_2) & \sin(x_2) & \sin(2x_2) \\ 1 & \cos(x_3) & \cos(2x_3) & \sin(x_3) & \sin(2x_3) \\ 1 & \cos(x_4) & \cos(2x_4) & \sin(x_4) & \sin(2x_4) \\ 1 & \cos(x_5) & \cos(2x_5) & \sin(x_5) & \sin(2x_5) \\ 1 & \cos(x_6) & \cos(2x_6) & \sin(x_6) & \sin(2x_6) \end{bmatrix}.$$

Problema teórico: existencia y unicidad del ajuste polinomial y del ajuste trigonométrico

Basándose en los resultados de los problemas teóricos anteriores, explique por qué tanto el problema del ajuste polinomial (con $m \leq n$) como el problema del ajuste trigonométrico (con $2p + 1 \leq n$) tiene una única solución.