Práctico 5 - Mínimos cuadrados

Los ejercicios 10 y 12 son los "entregables" de este práctico. Todo estudiante inscripto en el curso va a tener asignado un único ejercicio del práctico 4, 5, o 6 para entregar antes del comienzo del segundo período de parciales. **El 21 de noviembre vamos a avisar qué ejercicio le corresponde a cada estudiante, por lo que recomendamos fuertemente haber terminado y tener escrito los ejercicios 10 y 12 para esa fecha.**

Ejercicio 1 (Un ajuste polinomial)**.** Se dispone de un conjunto de observaciones $\{(x_i, y_i) : i = 1, \ldots, n\}$, que se quieren aproximar por una función $f(x) = ax^3 + bx + c$.

a) Deducir las ecuaciones normales para este modelo.

b) Escribir un algoritmo que utilice la descomposición QR[1] para resolver el problema anterior y aplicarlo a los datos $\{(-1, 7/2), (0, 3/2), (1, 2), (2, 11/5), (3, 3)\}$.

Ejercicio 2 (Masas atómicas)**.** El nitrógeno y el oxígeno tienen pesos atómicos (expresados en la unidad llamada de *masas atómicas unificadas*) $N \approx 14$ y $O \approx 16$. Se quieren usar los pesos moleculares de los seis óxidos de nitrógeno que se muestran abajo para determinar los pesos atómicos del nitrógeno y el oxígeno con cuatro dígitos decimales:

$$NO = 30{,}006, \qquad N_2O = 44{,}013, \qquad NO_2 = 46{,}006,$$
$$N_2O_3 = 76{,}012, \qquad N_2O_5 = 108{,}010, \qquad N_2O_4 = 92{,}011.$$

Determinar el sistema sobredeterminado de ecuaciones y computar la solución de mínimos cuadrados.

Ejercicio 3 (*Outliers*)**.** Aquí tenemos 25 observaciones, $\{y_k\}_{k=1}^{25}$, tomados en valores de t equiespaciados:

```
t = (1:25)'
y = [ 5.0291  6.5099  5.3666  4.1272  4.2948
      6.1261  12.5140 10.0502 9.1614  7.5677
      7.2920  10.0357 11.0708 13.4045 12.8415
      11.9666 11.0765 11.7774 14.5701 17.0440
      17.0398 15.9069 15.4850 15.5112 17.6572]
y = y';
y = y(:);
```

a) Ajustar los datos con una función lineal $y(t) = \beta_1 + \beta_2 t$ y graficar las componentes del residuo $y(t_k) - y_k$. Al hacerlo, se debería observar que uno de los datos presenta un residuo mucho mayor que los otros. Ese sea seguramente un *valor atípico* (también llamado *outlier*).

b) Descartar el valor atípico y ajustar nuevamente los datos con una recta. Graficar los residuos nuevamente. ¿Se ve algún patrón en los residuos?

c) Ajustar los datos, excluyendo al valor atípico, con un modelo de la forma $y(t) = \beta_1 + \beta_2 t + \beta_3 \operatorname{sen} t$.

[1] Para este fin, puede ser útil el comando `qr`.

d) Evaluar el ajuste de la parte anterior en una grilla más fina sobre el intervalo $[0, 26]$. Graficar la curva ajustada, los datos, y marque al valor atípico usando un marcador diferente (por ejemplo, usando el estilo `'o'` para los datos y `'*'` para el valor atípico).

Ejercicio 4 (Reflexiones de Householder)**.** a) Sea $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 9 \\ 2 \\ 6 \end{bmatrix}$. Hallar la reflexión de Householder H que cumple $H\mathbf{x} = \begin{bmatrix} -11 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$.

b) Hallar (computacionalmente) vectores no nulos $\mathbf{u}$ y $\mathbf{v}$ tales que $H\mathbf{u} = -\mathbf{u}$, $H\mathbf{v} = \mathbf{v}$. Pueden ser útiles los comandos `eig` o `eigs`.

Ejercicio 5 (Mínimos cuadrados triangular superior)**.**

a) ¿Cuál es la norma Euclídea mínima del vector residuo para el problema de mínimos cuadrados

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}?$$

b) ¿Cuál es la solución a este problema?

Ejercicio 6 (Householder y QR)**.** Supongamos que se está computando la factorización QR de la matriz

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix}$$

mediante transformaciones de Householder.

a) ¿Cuántas transformaciones de Householder se requieren?

b) ¿Cómo queda la primer columna de A luego de aplicar la primera transformación?

c) ¿Cómo queda la primer columna de A luego de aplicar la segunda transformación?

Ejercicio 7 (Basado en el examen de julio de 2024)**.** Consideremos los puntos $\{(x_i, y_i)\}_{i=0\ldots,3}$ dados por $(0, 1)$, $(\pi/2, 2)$, $(\pi, 1)$, $(3\pi/2, 1)$. Queremos ajustar a dichos puntos con una función de la forma

$$y \approx f(x) = a\cos(x) + b\,\mathrm{sen}(x) + c\cos(4x),$$

en el sentido de los mínimos cuadrados.

a) ¿Cuál es la matriz de diseño del problema?

b) Escribir y resolver las ecuaciones normales asociadas al problema. ¿Están bien condicionadas?

c) Si se quiere resolver el problema de mínimos cuadrados mediante un método de ortogonalización usando reflexiones de Householder, ¿cuál es la primer transformación que se debe tomar? ¿Cuántas reflexiones se deben hacer?

Ejercicio 8 (Comparación de métodos)**.** Sea $\delta \geq 0$.

a) ¿Cuál es la solución exacta al problema de mínimos cuadrados lineal

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \delta & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}?$$

b) Resolver computacionalmente este problema usando los siguientes métodos. Para cada método, experimentar con el valor de δ para determinar qué tan pequeño puede ser y aún obtenerse resultados precisos. Prestar atención en especial a valores de alrededor de $\delta \approx \sqrt{\varepsilon_M}$ y $\delta \approx \varepsilon_M$. Justificar los resultados obtenidos.

   I. Ecuaciones normales.
   II. Ortogonalización usando reflexiones de Householder.
   III. Descomposición SVD con el comando `svd`.

Ejercicio 9 (Condicionamiento en el cálculo de pseudoinversas)**.** Consideremos la familia de matrices $\{A_\delta\}_{\delta \geq 0} \subset \mathcal{M}_2(\mathbb{R})$ dada por

$$A_\delta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \delta \end{bmatrix}.$$

Para cada $\delta \geq 0$, calcular la pseudoinversa A_δ^+. ¿Qué implica esto sobre el condicionamiento del problema de computar la pseudoinversa de una matriz dada?

Ejercicio 10 (Órbita planetaria)**.** Un cierto planeta sigue una órbita elíptica, que en el plano puede ser escrita mediante la ecuación

$$x^2 = ay^2 + bxy + cx + dy + e,$$

donde los coeficientes orbitales a, b, c, d, e son desconocidos.

a) Se tienen las siguientes 10 observaciones de la posición del planeta:

x	1.02	0.95	0.87	0.77	0.67	0.56	0.44	0.30	0.16	0.01
y	0.39	0.32	0.27	0.22	0.18	0.15	0.13	0.12	0.13	0.15

Determinar los coeficientes orbitales resolviendo el sistema de ecuaciones resultante de tamaño 10×5. Graficar las observaciones junto a la órbita resultante. Para ello, pueden ser útiles las funciones `meshgrid` y `contour`,

```
[X,Y] = meshgrid(xmin:deltax:xmax,ymin:deltay:ymax);
Z = a*X.^2 + b*X.*Y + c*Y.^2 + d*X + e*Y + f;
contour(X,Y,Z,[0 0])
```

b) Este problema está cerca de ser de rango deficiente. Para ver el efecto que esto tiene en la solución, perturbar los datos un poco sumando en cada coordenada de cada observación un número aleatorio en el intervalo $[-0{,}0005, 0{,}0005]$. Computar los nuevos coeficientes para los datos perturbados, y graficar las órbitas resultantes con las observaciones originales y las perturbadas.

c) Usar la descomposición SVD para computar la solución al problema de la parte a). Con los valores singulares ordenados en forma decreciente, computar las órbitas resultantes al tomar los primeros k valores singulares, $k = 1, \dots, 5$.

d) Repetir la parte b), pero ahora usando las aproximaciones de rango más bajo de la matriz de mínimos cuadrados. ¿Qué efecto tiene ahora la perturbación de los coeficientes sobre las órbitas computadas? ¿Qué solución te parece mejor: una que aproxime las observaciones de forma más precisa o una que sea menos sensible respecto a perturbaciones?

Ejercicio 11 (Gauss-Newton)**.** Aplicar el método de Gauss-Newton para ajustar la función $f(x) = a(1 - e^{-bx})$ a los datos

$$\left\{ \begin{bmatrix} 0{,}25 \\ 0{,}28 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0{,}75 \\ 0{,}57 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1{,}25 \\ 0{,}68 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1{,}75 \\ 0{,}74 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 2{,}25 \\ 0{,}79 \end{bmatrix} \right\}.$$

Usar como iterados iniciales $a = b = 1$.

Ejercicio 12 (Concentración de sustancia)**.** Se espera que la concentración de una determinada sustancia en sangre decaiga exponencialmente en el tiempo. Vamos a ajustar la función modelo

$$y = f(t; \mathbf{x}) = x_1 e^{x_2 t}, \quad \mathbf{x} = [x_1, x_2]^t,$$

a los datos

t	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
y	6.80	3.00	1.50	0.75	0.48	0.25	0.20	0.15

a) Realizar un ajuste de los datos usando el método de Gauss-Newton.

b) Tomando logaritmo de la función modelo, se obtiene

$$\log(y) = \log(x_1) + x_2 t,$$

que es un modelo lineal en los parámetros $(\log(x_1), x_2)$. Realizar un ajuste de mínimos cuadrados lineal para hallar estos nuevos parámetros.

c) Graficar y comparar las soluciones obtenidas con los dos métodos. ¿Coinciden los valores de $\mathbf{x}$ determinados en las partes anteriores? ¿Coinciden los residuos? ¿Es esperable lo que se observa computacionalmente?

Ejercicio 13 (Relación entre peso y altura)**.** La siguiente tabla computa la altura y el peso medio de niños de entre 2 y 11 años de edad.

edad	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
altura (m)	0.912	0.986	1.060	1.130	1.190	1.260	1.320	1.380	1.410	1.490
peso (kg)	13.7	15.9	18.5	21.3	23.5	27.2	32.7	36.0	38.6	43.7

Se espera que la relación entre altura (h) y el peso (p) sea de la forma

$$p = c_1 h^{c_2}.$$

Repetir las partes a)–c) del ejercicio anterior usando este modelo y datos.

Ejercicio 14 (Gauss-Newton para problemas lineales)**.** Demostrar que el método de Gauss-Newton aplicado al sistema lineal $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ converge en un paso a la solución de las ecuaciones normales.