Universidad de Puerto Rico
Departamento de Matemáticas
Humacao, Puerto Rico 00791

MATE 4061 | Análisis Numérico | Prof. Pablo Negrón

Laboratorio 8: Aproximación de Cuadrados Mínimos

Consideramos ahora el problema de aproximar o *ajustar* una función en un número grande de datos que contienen posiblemente un cierto grado de error. En lugar de tratar de ajustar un polinomio de alto grado o insistir en interpolar datos que sabemos tienen un cierto grado de error, lo que hacemos es que buscamos una función que en cierto sentido suavice las fluctuaciones en los datos y a la vez resalte las características esenciales de estos. En el método de cuadrados mínimos, se minimiza la suma de los cuadrados de las diferencias entre los datos y la función que se usa para aproximar estos.

Suponga que los datos están dados por (x_k, y_k) donde $k = 1, 2, \ldots, m$. La función que usamos para aproximar estos datos tiene la forma general:

$$g(x) = a_1\phi_1(x) + a_2\phi_2(x) + \cdots + a_n\phi_n(x), \tag{1}$$

donde las funciones $\{\phi_i : 1 \le i \le n\}$ son funciones dadas y los $\{a_i : 1 \le i \le n\}$ son desconocidas. Las diferencias entre los datos y la función $g(x)$ están dadas por:

$$\epsilon_k = y_k - (a_1\phi_1(x_k) + a_2\phi_2(x_k) + \cdots + a_n\phi_n(x_k)) \quad , \quad 1 \le k \le m. \tag{2}$$

Buscamos pues minimizar la suma de los cuadrados de estas diferencias dada por:

$$S = \sum_{k=1}^{m} \epsilon_k^2. \tag{3}$$

Bajo ciertas condiciones en los datos $\{(x_k, y_k) : k = 1, 2, \ldots, m\}$, los valores de $\{a_i : 1 \le i \le n\}$ que minimizan a S son solución del sistema lineal de ecuaciones (*ecuaciones normales*):

$$A^t A a = A^t b, \tag{4}$$

donde

$$A = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \phi_3(x_1) & \cdots & \phi_n(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \phi_3(x_2) & \cdots & \phi_n(x_2) \\ \phi_1(x_3) & \phi_2(x_3) & \phi_3(x_3) & \cdots & \phi_n(x_3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x_m) & \phi_2(x_m) & \phi_3(x_m) & \cdots & \phi_n(x_m) \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad , \quad b = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}. \tag{6}$$

La solución a de las ecuaciones normales se conoce como la *solución de cuadrados mínimos* para los datos $\{(x_k, y_k) : k = 1, 2, \ldots, m\}$ usando las funciones base $\{\phi_i : 1 \le i \le n\}$. Una forma de medir el error en dicha aproximación es con el *residual* el cual esta dado por la expresión (3) donde los coeficientes en $g(x)$ corresponden a la solución de cuadrados mínimos.

Cuadrados Mínimos Polinomial

En el caso $\phi_i(x) = x^{i-1}$, $1 \le i \le n$ el problema de minimizar S se conoce como el problema de *cuadrados mínimos polinomial* y la matriz A toma la forma:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \cdots & x_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \cdots & x_m^{n-1} \end{pmatrix}. \tag{7}$$

En MATLAB podemos resolver el problema de cuadrados mínimos polinomial usando la función `polyfit` la cual básicamente ensambla y resuelve las ecuaciones normales usando (7).

Ejemplo 1. Considere los datos $(0,5),(1,-2),(2,3)$. Vamos a buscar la mejor recta que que aproxima estos datos en el sentido de los cuadrados mínimos. Esto lo calculamos en MATLAB mediante:

```
x=[0,1,2];
y=[5,-2,3];
a=polyfit(x,y,1);
z=linspace(-1,3,50);
y1=polyval(a,z);
plot(x,y,'kx',z,y1,'k')
axis([-1,3,-4,7])
legend('Datos','Mejor Recta')
residual=norm(y-polyval(a,x));
```

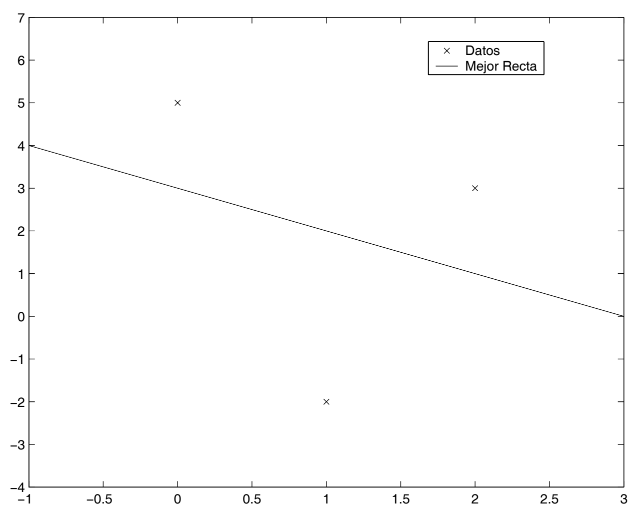

Figura 1: Mejor recta en el sentido de cuadrados mínimos que aproxima a los datos $(0,5),(1,-2),(2,3)$.

Cuadrados Mínimos No–Polinomiales

La aproximación de cuadrados mínimos polinomial se usa cuando por alguna razón se piensa que los datos se pueden representar mejor con un polinomio. Pero este no tiene que ser el caso. Por ejemplo, si los datos provienen de una función periódica, entonces tal ves serí mejor utilizar funciones trigonométricas para las funciones base.

Ejemplo 2. Consideramos nuevamente los datos $(0,5),(1,-2),(2,3)$, pero en esta ocasión vamos a representar estos datos con una función de la forma:

$$g(x) = a\sin(x) + b\cos(x).$$

La matriz A de las ecuaciones normales esta dada ahora por (5) donde $m = 2$ y $\phi_1(x) = \sin(x)$, $\phi_2(x) = \cos(x)$. Calculamos a, b con el siguiente programa en MATLAB:

```
x=[0,1,2];
y=[5,-2,3];
A=[sin(x)',cos(x)'];
a=(A'*A)\(A'*y');
z=linspace(-1,3,50);
y1=a(1)*sin(z)+a(2)*cos(z);
plot(x,y,'kx',z,y1,'k')
axis([-1,3,-4,7])
legend('Datos','Mejor Funcion Trigonometrica')
residual=norm(y-a(1)*sin(x)+a(2)*cos(x));
```

Se obtuvo que los coeficientes en $g(x)$ son $a = 0.5918$, $b = 1.7923$. En la Figura (2) se muestran los datos y la mejor función en el sentido de cuadrados mínimos de la forma $a\sin(x) + b\cos(x)$. ¿Cómo podemos decidir cual de las dos aproximaciones es mejor? Una forma de comparar ambas soluciones es mediante el residual (3). Para la mejor recta la raíz cuadrada del residual es 4.8990 mientras que para la función periódica fue de 7.1707. Así que en base a esto podemos concluir que la mejor recta aproxima mejor a los datos que la representación periódica.

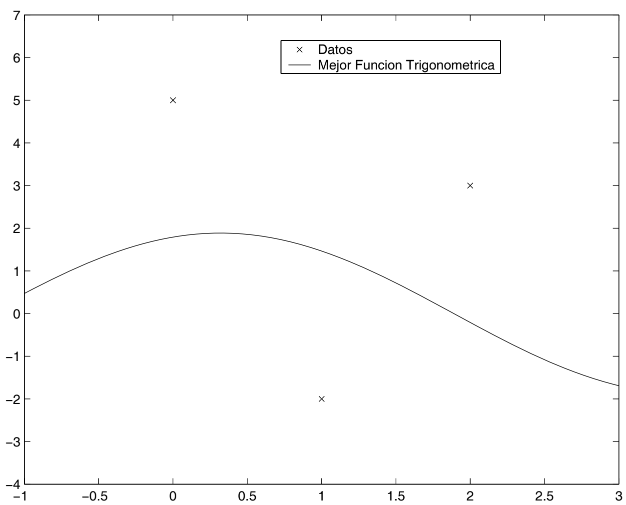

Figura 2: Mejor función de la forma $a\sin(x) + b\cos(x)$ que aproxima a los datos $(0,5),(1,-2),(2,3)$ en el sentido de los cuadrados mínimos.

La Factorización QR

La matriz de coeficientes A^tA de las ecuaciones normales es en general una matriz mal acondicionada según la m aumenta. Para resolver estas ecuaciones en forma eficiente y estable, se utiliza la llamada factorización QR de la matriz A.

Teorema 1 (Factorización QR). *Sea A una matriz $m \times n$ de rango n. Entonces existe una matriz Q de tamaño $m \times n$ con $Q^tQ = I$, y una matriz R de tamaño $n \times n$ triangular superior y nosingular tal que $A = QR$.*

Utilizando la factorización QR de la matriz A que aparece en las ecuaciones normales, podemos calcular la solución del problema de cuadrados mínimos en forma eficiente y sin problemas de mal acondicionamiento.

Teorema 2. *Sea A una matriz $m \times n$ de rango n y $A = QR$ la factorización QR de A dada por el teorema anterior. Entonces la solución a de las ecuaciones normales $A^tAa = A^tb$ se puede obtener resolviendo el sistema triangular $Ra = Q^tb$.*

Demostración: Dado que $A = QR$ tenemos que:

$$A^tAa = (R^tQ^t)(QR)a = R^t(Q^tQ)Ra = R^tIRa = R^tRa$$

De igual forma: $A^tb = (R^tQ^t)b = R^t(Q^tb)$. Como R es nosingular R^t también lo es y tenemos pues que $A^tAa = A^tb$ es equivalente al sistema $Ra = Q^tb$. □

Ejemplo 3. Vamos a calcular el polinomio de grado cinco de la forma $a_1+a_2x+a_3x^2+a_4x^3+a_5x^4+a_6x^5$ que mejor aproxima a los datos $(x, \Gamma(x+1))$ donde $x = 0 : 0.1 : 1$. Usamos la función `gamma` de MATLAB para generar los datos. Tenemos pues:

```
x=[0:0.1:1];
y=gamma(x+1);
A=ones(length(x),6);
for k=2:6
    A(:,k)=x'.*A(:,k-1);
end
[Q,R]=qr(A);
a=R\(Q'*y');
z=[0:.01:1];
y1=hornerV(a,z');
plot(x,y,'kx',z,y1,'k')
legend('Datos','Mejor Polinomio')
residual=norm(y'-hornerV(a,x'));
```

El residual de la solución de cuadrados mínimos es de 8.5233e-005. Los resultados se muestran en la Figura (3).

Ejercicio 1. *Considere los datos dados por los vectores x=[0:0.25:3], y=[6.3806, 7.1338, 9.1662, 11.5545, 15.6414, 22.7371, 32.0696, 47.0756, 73.1596, 111.4684, 175.9895, 278.5550, 446.4441]. Aproxime estos datos con funciones de la forma:*

a) $g(x) = a + b\exp(x) + c\exp(2x)$.

b) $g(x) = a + b/(1 + x) + c/(1 + x)^2$.

c) $g(x) = a + bx + cx^2 + dx^3$.

Modifique los programas de cuadrados mínimos dados anteriormente según sea necesario. Trace las tres funciones $g(x)$ y los datos originales en un mismo sistema de coordenadas. ¿Qué tan bien aproximan estas funciones a los datos?

Ejercicio 2. *Halle el polinomio cuadrático que mejor aproxima a los datos* $(-2, 2), (-1, 1), (0, 1), (1, 1), (2, 2)$ *en el sentido de los cuadrados mínimos. Trace los datos y la cuadrática resultante en el mismo sistema de coordenadas.*

Ejercicio 3. *Usando una función de la forma $y = ax\exp(-bx)$, a, b constantes a ser determinadas, halle las ecuaciones normales para la mejor aproximación de cuadrados mínimos de esta forma a los datos* $(1, 1.2)$, $(1.5, 1.4)$, $(1.75, 1.45)$, $(2, 1.5)$, $(3, 1.3)$.

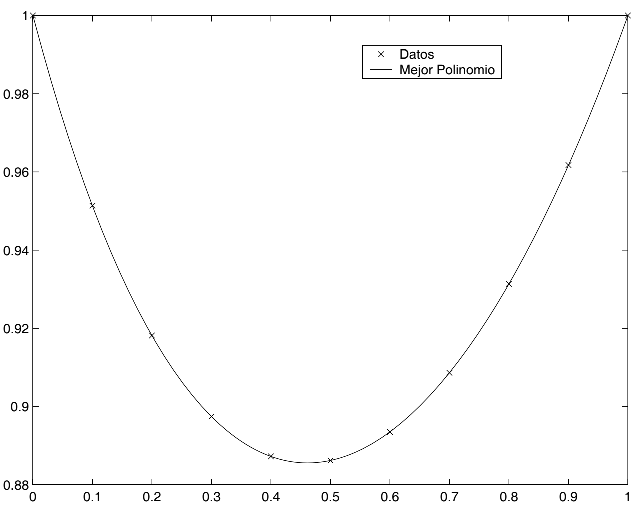

Figura 3: Mejor polinomio de grado cinco que aproxima los datos $(x, \Gamma(x+1))$ donde $x = 0 : 0.1 : 1$ en el sentido de los cuadrados mínimos.