Computación de Altas Prestaciones

Teoría: Sesión 13

1

CAP-MUIinf

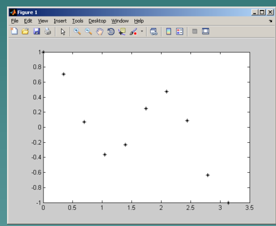
Contenido

1. Introducción a la aproximación de funciones.
2. Aproximación polinómica mediante mínimos cuadrados.
3. Aplicaciones.
4. Sistemas sobredeterminados.
5. Ecuaciones normales.
6. La descomposición QR.
7. Aplicaciones de la descomposición QR.

2

1. Introducción

- En ocasiones, ya sea porque se dispone de una serie de puntos medidos de manera experimental o porque se dispone de una función muy costosa de evaluar, es conveniente disponer de funciones sencillas que nos permitan:
  - Estimar el valor de la función en un nuevo punto.
  - Dibujar una gráfica que pase por dichos puntos o que muestre la tendencia de los datos.

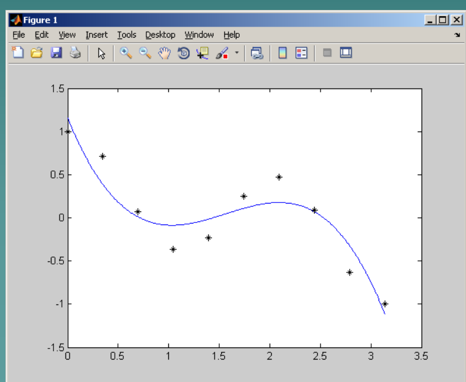


- Entre las técnicas conocidas, denominadas de aproximaciones de funciones, encontramos:
  - Aproximación por mínimos cuadrados.
  - Interpolación.

3

1. Introducción

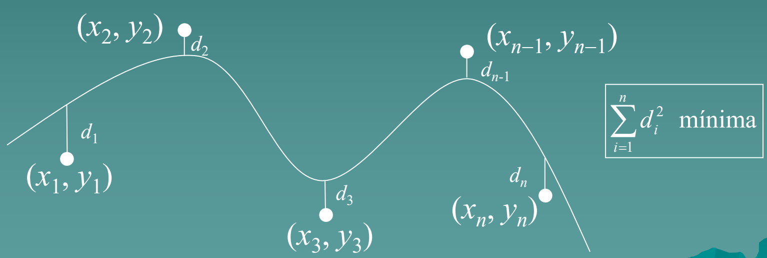
- Aproximación por mínimos cuadrados: Aplicable cuando los datos pueden tener un grado significativo de error. El objetivo será generar una función que pase lo más cerca posible de los datos y recoja su tendencia general.
- Se pretende obtener un modelo simple a partir de un conjunto de datos observados.



4

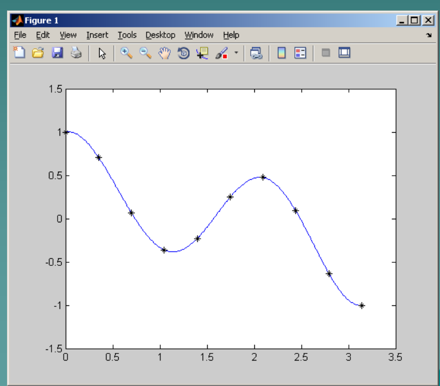
1. Introducción

- Criterio basado en mínimos cuadrados: Consiste en encontrar un polinomio de manera que la suma de los cuadrados de las diferencias (d_i) entre las ordenadas del polinomio y las ordenadas de los puntos sea mínima.



1. Introducción

- Interpolación: Aplicable cuando los datos son muy precisos. El objetivo será generar una función, o un conjunto de funciones, que pasen por cada uno de los puntos de partida.



2. Aproximación polinómica mediante mínimos cuadrados

- Definición: Sea un conjunto finito de *n* puntos

  $\{(x_1,y_1), (x_2,y_2),\ldots,(x_n,y_n)\}$

  con abscisas distintas dos a dos. La aproximación polinómica de grado *m* por mínimos cuadrados es el polinomio

  $P_m(x)=a_m x^m + a_{m-1}x^{m-1} + \ldots + a_1 x + a_0$

  de grado *m*, con $m<n$, tal que $g(a_0, a_1,\ldots,a_m)$ sea mínimo, siendo

$$g(a_0,a_1,\cdots,a_m)=\sum_{i=1}^{n}\left(P_m(x_i)-y_i\right)^2$$

- Es decir, de todos los polinomios de grado *m*, con $m<n$, es el que minimiza el error cuadrático de la aproximación.

7

CAP-MUIinf

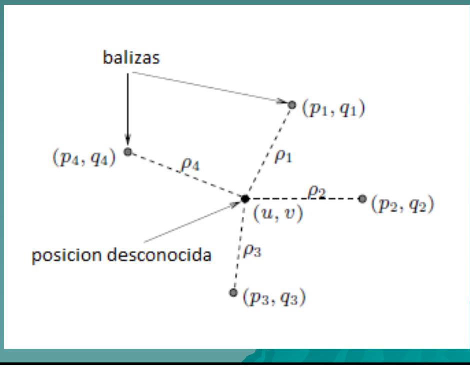
2. Aproximación polinómica mediante mínimos cuadrados

- El criterio de los mínimos cuadrados es el mismo que se usa en Estadística para definir los polinomios de regresión.
- Para n puntos, podemos elegir diferentes grados (0, 1, 2, …, n-1) para el polinomio de aproximación:
  - El polinomio de aproximación de grado 0 corresponde a la media aritmética de las ordenadas.
  - El polinomio de aproximación de grado 1 corresponde a la denominada recta de regresión.
  - Cuando el grado elegido es igual a n-1 se obtiene el polinomio de interpolación, es decir el polinomio que pasa por todos los puntos de partida.

8

3. Aplicaciones

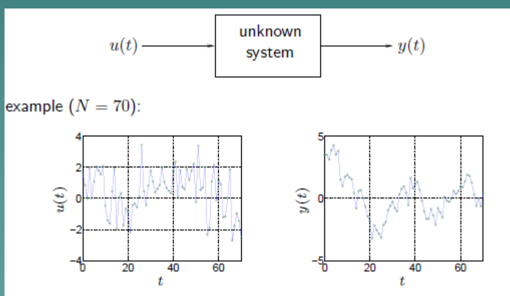
- Ejemplo de navegación (estimación de la posición de robots móviles o vehículos autónomos): Dado un conjunto de "balizas" y un conjunto de distancias, encontrar el punto que está a las distancias deseadas de cada baliza (o lo más cerca posible de esas distancias).



9

3. Aplicaciones

- Identificación de sistemas: Supongamos que tenemos un sistema físico, al que le aplicamos una entrada u(t) y produce una salida y(t).
- Pretendemos obtener un modelo razonable basado en los datos medidos.



10

CAP-MUIinf

3. Aplicaciones

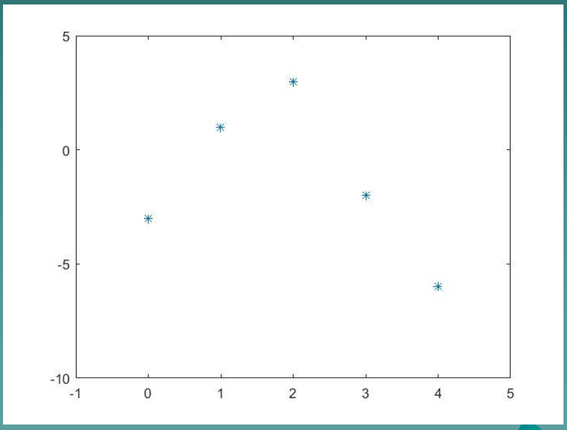
- Estimación de parámetros en problemas de financieros y de bolsa, estimación de ventas, ocupación hotelera, encuestas, etc.: Con frecuencia se intenta "prever" el futuro ajustando un modelo a los datos del pasado y utilizando ese modelo para realizar pronósticos.
- Big data: La extracción de características comunes de grandes cantidades de datos (Data Mining, Clustering) se hace por medio de técnicas (Principal component analysis, k-means, regresión) que dependen en última instancia de resolución de problemas de mínimos cuadrados.

11

CAP-MUIinf

3. Ejemplo

- Determinar el polinomio de grado 2 que se ajusta a los siguientes puntos: (0,-3), (1,1), (2,3), (3,-2), (4,-6).



12

3. Ejemplo

- Como $P_2(x)=a_2x^2+a_1x+a_0$, debemos determinar a_2, a_1 y a_0.
- Para ello, sustituimos cada punto en la expresión del polinomio $P_2(x)$, obteniendo un sistema sobredeterminado, con 5 ecuaciones y 3 incógnitas (a_2, a_1 y a_0):

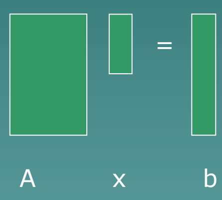
$$\begin{aligned} 0\cdot a_2 + 0\cdot a_1 + a_0 &= -3 \\ 1\cdot a_2 + 1\cdot a_1 + a_0 &= 1 \\ 4\cdot a_2 + 2\cdot a_1 + a_0 &= 3 \\ 9\cdot a_2 + 3\cdot a_1 + a_0 &= -2 \\ 16\cdot a_2 + 4\cdot a_1 + a_0 &= -6 \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 \\ a_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 1 \\ 3 \\ -2 \\ -6 \end{pmatrix}$$

Ea=y

13

4. Sistemas sobredeterminados

- Sea un sistema de ecuaciones lineales Ax=b, donde $A \in \Re^{m*n}$, $x \in \Re^n$ y $b \in \Re^m$. Si m>n decimos que el sistema es sobredeterminado, es decir, el sistema tiene más ecuaciones que incógnitas.



- Supondremos que la matriz A es de rango máximo (n).

14

4. Sistemas sobredeterminados

- En un sistema de ecuaciones lineales determinado, obtendremos la solución con un residuo $||Ax-b||_2$ igual a 0.
- En un sistema sobredeterminado, normalmente obtendremos una solución con una norma del residuo mayor que cero (equivale a decir que las ecuaciones no se satisfacen de forma exacta).
- Buscamos el vector x solución que minimiza la norma del residuo: $||Ax-b||_2$.
- Métodos de resolución:
  - Ecuaciones normales.
  - Descomposición QR.

15

5. Ecuaciones normales

- Si la matriz A tiene rango de columnas completo (rango de A igual a n), la solución se puede obtener resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$Ax=b \rightarrow A^TAx=A^Tb$$

- Ventajas:
  - Es un método sencillo.
  - La matriz A^T*A es simétrica y definida positiva: se puede usar Cholesky.
- Inconvenientes:
  - Es un método potencialmente impreciso y el coste del producto de matrices puede ser considerable.
  - Habitualmente se prefiere la descomposición QR o, si la matriz A no es de rango de columnas completo, la descomposición SVD.

16

5. Ecuaciones normales

- Algoritmo para la obtención de los coeficientes del polinomio de aproximación de grado *m* a un conjunto de *n* puntos:
  1. Obtener la matriz *E.*
  2. Calcular $A=E^TE$.
  3. Calcular $b=E^Ty$.
  4. Resolver el sistema de ecuaciones lineales $Aa=b$.

$$E^T E a = E^T y$$

$$E = \begin{pmatrix} x_1^m & x_1^{m-1} & \dots & 1 \\ x_2^m & x_2^{m-1} & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n^m & x_n^{m-1} & \dots & 1 \end{pmatrix}; \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}; \quad a = \begin{pmatrix} a_m \\ a_{m-1} \\ \vdots \\ a_0 \end{pmatrix}$$

17

CAP-MUIinf

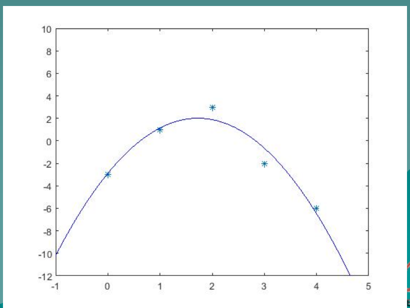
5. Ecuaciones normales

- Resolución del ejemplo anterior:

$$E = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \\ 16 & 4 & 1 \end{pmatrix} \quad A = E^T E = \begin{pmatrix} 354 & 100 & 30 \\ 100 & 30 & 10 \\ 30 & 10 & 5 \end{pmatrix} \quad b = E^T y = \begin{pmatrix} -101 \\ -23 \\ -7 \end{pmatrix}$$

- Resolver $Aa=b$ $\quad a = \begin{pmatrix} -1.6429 \\ 5.6714 \\ -2.8857 \end{pmatrix}$
- Solución:

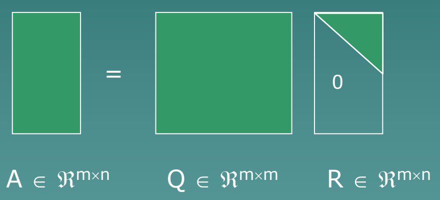
$$P(x) = -1.6429x^2 + 5.6714x - 2.8857$$



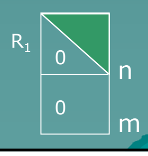
18

6. La descomposición QR

- Dada una matriz $A \in \Re^{m\times n}$ de rango n, existen matrices Q y R tales que A=QR, donde:
  - $Q \in \Re^{m\times m}$ es una matriz ortogonal ($Q^{-1}=Q^T$).
  - $R \in \Re^{m\times n}$ es una matriz triangular superior.



siendo $R_1 \in \Re^{n\times n}$ una matriz triangular superior.



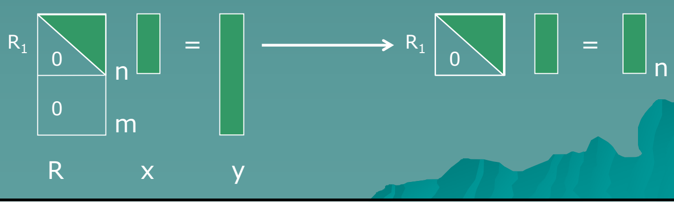
19

7. Aplicaciones de la descomposición QR

- Resolución de sistemas de ecuaciones lineales determinados o sobredeterminados: Dado el sistema Ax=b, $A \in \Re^{m\times n}$, $x \in \Re^{n}$, $b \in \Re^{m}$, m>=n, es posible resolverlo usando la descomposición QR:

$$Ax = b \rightarrow QRx = b \rightarrow Rx = Q^{-1}b \rightarrow Rx = Q^{T}b \rightarrow Rx = y$$

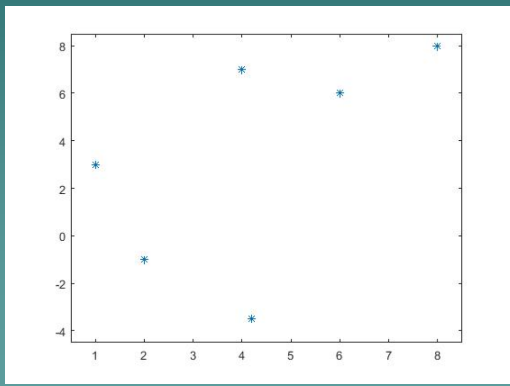
Sistema de ecuaciones triangular superior



20

7. Ejemplo

- Determinar el polinomio de grado 3 que se ajusta a los siguientes puntos: (1,3), (2,-1), (4,7), (4.2,-3.5), (6,6) , (8,8).



7. Ejemplo

- Como $P_3(x)=a_3x^3+a_2x^2+a_1x+a_0$, debemos determinar a_3, a_2, a_1 y a_0.
- Para ello, sustituimos cada punto en la expresión del polinomio $P_3(x)$, obteniendo un sistema sobredeterminado, con 6 ecuaciones y 4 incógnitas (a_3, a_2, a_1 y a_0):

$$\begin{aligned}
&1\cdot a_3 + 1\cdot a_2 + 1\cdot a_1 + a_0 = 3\\
&8\cdot a_3 + 4\cdot a_2 + 2\cdot a_1 + a_0 = -1\\
&64\cdot a_3 + 16\cdot a_2 + 4\cdot a_1 + a_0 = 7\\
&74.088\cdot a_3 + 17.64\cdot a_2 + 4.2\cdot a_1 + a_0 = -3.5\\
&216\cdot a_3 + 36\cdot a_2 + 6\cdot a_1 + a_0 = 6\\
&512\cdot a_3 + 64\cdot a_2 + 8\cdot a_1 + a_0 = 8
\end{aligned}
\Rightarrow
\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1\\ 8 & 4 & 2 & 1\\ 64 & 16 & 4 & 1\\ 74.088 & 17.64 & 4.2 & 1\\ 216 & 36 & 6 & 1\\ 512 & 64 & 8 & 1 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} a_3\\ a_2\\ a_1\\ a_0 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 3\\ -1\\ 7\\ -3.5\\ 6\\ 8 \end{pmatrix}$$

Ea=y

7. Ejemplo

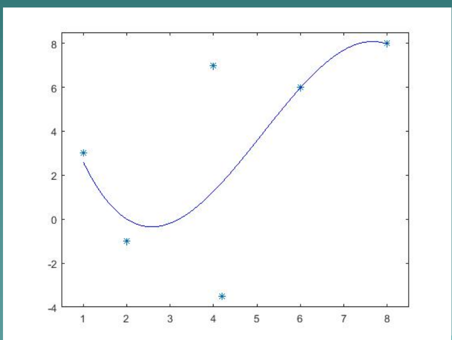
- Para resolver el sistema, buscamos la mejor solución posible, es decir, la que minimiza $||Ea-y||_2$. Calculamos en Matlab la descomposición QR de la matriz:

```
>> [Q, R] = qr(E)

Q =

  -0.0018  -0.0620   0.5609   0.7647  -0.1856  -0.2497
  -0.0142  -0.2094   0.6703  -0.2355   0.4172   0.5265
  -0.1134  -0.5286   0.1279  -0.2898  -0.7721   0.1061
  -0.1313  -0.5487   0.0527  -0.2154   0.3892  -0.6936
  -0.3828  -0.4941  -0.4407   0.4623   0.2030   0.4002
  -0.9073   0.3573   0.1507  -0.1254  -0.0516  -0.0895

R =

 -564.3138  -76.0356  -10.5902   -1.5507
         0  -13.9558   -5.0058   -1.4855
         0         0    1.1961    1.1218
         0         0         0    0.3609
         0         0         0         0
         0         0         0         0
```


7. Ejemplo

- Resolvemos el sistema triangular superior $Ra=Q^Ty$. Nos quedamos con las filas primeras (tantas como columnas tenga R), dando lugar a un sistema cuadrado:

```
>> b = Q'*y
b =
   -9.8805
   -1.8625
    0.2852
    3.0253
   -6.9360
    3.5798

>> a = R(1:4, :) \ b(1:4)
a =
   -0.1287
    1.9760
   -7.6248
    8.3838
```



- Solución: $P_3(x) = -0.1287x^3 + 1.976x^2 - 7.6248x + 8.3838$