Análisis Numérico Maestría
Ejercicios: Unidades 4 (Mínimos cuadrados) y 5 (Valores y vectores propios)

Facultad de Ciencias, UNAM
7 de octubre de 2021

Unidad 4: Mínimos cuadrados lineales

1. Dados los siguientes vectores:

$$\alpha = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Encuentre la matriz de rotación G y el reflector de Householder F tales que:

$$G\alpha = \begin{bmatrix} 5 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad F\beta = \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

2. Dada la matriz

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 10 \\ 3 & 0 \end{bmatrix}$$

Calcule su factorización QR (a mano) utilizando los métodos de Gram-Schmidt, reflexiones de Householder y rotaciones de Givens.

3. El siguiente problema consiste en determinar la curva de crecimiento de una población de bacterias. Los datos a utilizar son, el número de individuos de una especie particular de bacterias (y_i) en el tiempo (t_i).

$t = [0, 4, 7.5, 25, 31, 48.75, 52, 58.5, 72.7, 78, 95, 96, 108, 112, 133, 136.75, 143, 156.5, 166.7, 181]$

$y = [8, 6, 6, 7, 8, 10, 13, 18, 33, 38, 76, 78, 164, 175, 280, 300, 320, 405, 385, 450]$

   a) Realize un programa que calcule el polinomio de ajuste de grado n (con n dada por el usuario) mediante el método de Ecuaciones normales.

b) ¿Qué pasa cuando el valor de n crece?, ¿es mejor el ajuste?, ¿tiene sentido para el fenómeno real?

4. Repita el proceso utilizando la factorización QR mediante el método de Householder. ¿Cómo son las gráficas ahora y los valores de los números de condición de la matriz R del sistema? Concluya.

5. Considere los siguientes datos, obtenidos de un experimento a intervalos de un segundo, con la primera observación en el tiempo t = 1.0:

t: 1 - 9	t: 10 -18	t: 19 - 25
5.0291	7.5677	14.5701
6.5009	7.2920	17.0440
5.3666	10.0357	17.0398
4.1272	11.0708	15.9069
4.2948	13.4045	15.4850
6.1261	12.8415	15.5112
12.5140	11.9666	17.6572
10.0502	11.0765	
9.1614	11.7774	

a) Utilizando ecuaciones normales, ajuste los datos por una línea recta $y(t) = \beta_1 + \beta_2 t$ y grafique los residuales $y(t_k) - y_k$. Observe que uno de los datos tiene un residual mucho mayor que el resto. Sospechamos que no encaja con el resto de los datos, es decir, es un valor atípico.

b) Deseche el valor atípico, y ajuste nuevamente los datos con una línea recta. Una vez más, grafique los residuales. ¿Qué patrón se observa en la gráfica de residuales? ¿Los residuos parecen aleatorios?

c) Para deshacerse de las tendencias de los residuos, ajustar los datos (ya sin el valor atípico) con un nuevo modelo

$$y(t) = \beta_1 + \beta_2 t + \beta_3 sen(t)$$

Grafica los resuduales. ¿parecen azarosos ahora?

6. Un fenómeno que puede presentarse al utilizar el método de Gram-Schmidt es la pérdida de ortogonalidad. En una A.P.F. de 5 dígitos con redondeo, considere la siguiente matriz

$$A = \begin{bmatrix} 0.70001 & 0.70711 \\ 0.70002 & 0.70711 \end{bmatrix}$$

Observe que la matriz es cercana a una de rango deficiente.

a) Calcule el primer paso de Gram-Schmidt (es decir $j = 1$) para obtener r_{11} y q_1.

b) Calcule el segundo paso y obtenga r_{12}, r_{22} y q_2.

c) Utilizando los incisos anteriores, dé la forma de las matrices Q y R de la factorización QR de A.

d) ¿Las columnas de Q son ortogonales?, ¿cómo afecta el rango deficiente de A a las columnas que se obtuvieron de Q? Concluya.

Hint: Recuerde que:

$$r_{ij} = \begin{cases} q_i^t a_j & i \neq j \\ ||a_j - \sum_{k=1}^{j-1} r_{kj} q_k||_2 & i = j \end{cases}$$

7. Para matrices que son de rango deficiente es natural observar una pérdida de ortogonalidad en la matriz Q de la factorización QR, por ejemplo para la matriz:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Un experimento interesante consiste en perturbar ligeramente la matriz de tal forma que

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1+\epsilon \\ 1+\epsilon & 1 & 1 \\ 1 & 1+\epsilon & 1 \end{bmatrix}$$

con ϵ pequeño. Tomando esta matriz perturbada, realice lo siguiente para valores de $\epsilon = 10^{-n}$ con $n = 0, 1, ..., 15$.

a) La factorización QR de la matriz por el método de Gram-Schmidt y verifique la ortogonalidad de la matriz Q resultante calculando la norma $||Q^t Q - I||$.

b) El mismo proceso pero mediante el método de reflexiones de Householder.

c) El mismo proceso pero mediante el método de rotaciones de Givens.

Elabore una tabla donde ilustre y pueda comparar los resultados, ¿qué puede concluir acerca de los métodos de factorización QR para matrices cercanas a una de rango deficiente?, ¿ cuál preserva mejor la ortogonalidad?

8. Los datos que sigue la trayectoria de un nuevo planeta detectado por la Agencia Espacial Mexicana (AEM) son:

$$\begin{bmatrix} \text{x} & 1.02 & 0.95 & 0.87 & 0.77 & 0.67 & 0.56 & 0.44 & 0.30 & 0.16 & 0.01 \\ \text{y} & 0.39 & 0.32 & 0.27 & 0.22 & 0.18 & 0.15 & 0.13 & 0.12 & 0.13 & 0.15 \end{bmatrix}$$

Con el fin de predecir la ubicación del planeta en determinado tiempo es necesario encontrar una buena aproximación a su órbita. Por ello la AEM recurre a usted con el fin de encontrar tal órbita. Tomando la ecuación:

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

a) Encuentre la órbita elíptica que mejor se ajuste utilizando el método de ecuaciones normales para encontrar los coeficientes de la cuadrática y grafique la órbita calculada junto con las observaciones. Calcule el valor del residual para este ajuste.

b) Encuentre ahora la órbita elíptica que mejor se ajuste utilizando el método de Gram-Schmidt para encontrar los coeficientes de la cuadrática y grafique la órbita calculada junto con las observaciones. Calcule también el valor del residual para este ajuste.

c) ¿Compare las graficas y residuales producidas por ambos métodos y concluya?

9. En un trabajo relacionado con el estudio de la eficiencia de la utilización de la energía por las larvas de la polilla modesta (Pachysphinx modesta), L. Schroeder [Schrl] utilizó los siguientes datos para determinar una relación entre W, el peso de las larvas vivas en gramos, y R, el consumo de oxígeno de las larvas en mililitros/hora. Por razones biológicas, se supone que entre W y R existe una relación de la forma $R = bW^a$.

W	R	W	R	W	R	W	R
0.017	0.154	0.211	0.366	3.040	3.590	0.233	0.537
0.087	0.296	0.999	0.771	4.290	3.600	0.783	1.470
0.174	0.363	3.020	2.010	5.300	3.880	1.350	2.480
1.110	0.531	4.280	3.280	0.020	0.180	1.690	1.440
1.740	2.230	4.580	2.960	0.119	0.299	2.750	1.840
4.090	3.580	4.680	5.100	0.210	0.428	4.830	4.660
5.450	3.520	0.020	0.181	1.320	1.150	5.530	6.940
5.960	2.400	0.085	0.260	3.340	2.830		
0.025	0.23	0.171	0.334	5.480	4.150		
0.111	0.257	1.290	0.870	0.025	0.234		

a) Encuentre el polinomio logarítmico lineal de mínimos cuadrados

$$\ln R = \ln b + a \ln W$$

utilizando el método de rotaciones de Givens.

b) Calcule el error asociado a la aproximación en la parte (a):

$$E = \sum_{i=1}^{37} (R_i - bW_i^a)^2.$$

c) Modifique la ecuación logarítmica de mínimos cuadrados de la parte (a) agregando el término cuadrático $c\,(\ln W_i)^2$, y después determine el polinomio logarítmico de mínimos cuadrados, use de nuevo el método de rotaciones de Givens. Calcule el error asociado a la aproximación.

d) Agregue ahora un término cúbico a la ecuación logaritmica y determine el polinomio logarítmico de mínimos cuadrados con rotaciones de Givens. Calcule también el error y concluya.

10. Los siguientes datos representan las tasas de mortalidad (por cien mil) para las personas de edad 20-45, en Inglaterra durante el siglo XX :

$20-26$	$27-33$	$34-40$	$41-45$
431	499	746	956
409	526	760	1014
429	563	778	1076
422	587	828	1134
530	595	846	1024
505	647	836	
459	669	916	

a) Usando ecuaciones normales, ajusta una línea a los datos y graficala junto con los datos. ¿Crees que los datos están bien representados por una línea recta?

b) El argumento sugiere que los datos pueden ser representados por diferentes líneas en los intervalos de edad [20,28], [28,39] y [39,45]. Ajuste tres lineas, es decir, para los datos de cada intervalo, y colócalas en el mismo gráfico. Se pueden determinar los ajustes de los datos de cada subrango con plena independencia ya que no hemos hecho ninguna hipótesis sobre las relaciones entre estas líneas.

c) El ajuste en (b) puede no ser continuo en 28 o en 39. Una manera de forzar la continuidad es elegir que la función del modelo tenga esta propiedad, para ello es necesario definir funciones básicas que garanticen la continuidad. Las cuatro funciones que sugerimos que se utilicen están representandas en la figura 1 y se nombran $l_i(x)$, $i = 1, .., 4$. Cada una de estas es definida y continua en $20 \leq x \leq 45$, por lo que cualquier combinación lineal de estas debe serlo. Utilizando estas funciones básicas resuelve el problema de mínimos cuadrados. Grafica la solución junto a los ajustes realizados en (a) y (b). ¿Cuál de estos tres produce el mejor ajuste?

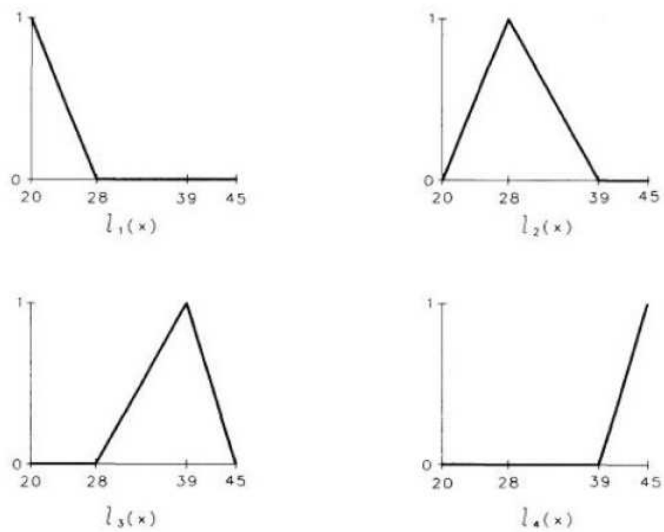

Figura 1: Funciones base.

11. En los laboratorios de física de partículas de la UNAM se hacen bombardeos con rayos laser sobre cierto tipo de particulas para determinar su posición en un cierto espacio. Al hacer el bombardeo, el laser despliega un haz de luz cuando hace contacto con la partícula, sin embargo, debido a las unidades tan pequeñas que se manejena, en ocasiones hay errores en la medición. Un equipo de estudio recolecto los siguientes datos de las posiciones de los haces de luz al hacer el bombardeo sobre una determinada partícula (los datos están dados en micras):

x	y	z
0.26	1.9	3.6
0.23	1.92	7
0.255	4.5	3.52
0.27	4.42	7.1
2.74	1.92	3.53
2.75	1.92	6.99
2.77	4.4	3.56
2.74	4.45	7.056
0.25	3.3	5.9
2.7	3.2	5.82
1.6	1.93	5.8
1.5	4.5	5.75

Con el fin de encontrar las coordenadas de la particula requerida se requiere ajustarla a una forma esférica.

a) Dada la ecuación de una esfera:

$$(x-a)^2 + (y-b)^2 + (z-c)^2 = r^2$$

expanda la expresión, de tal forma que le quede un polinomio cuadrático en x, y, z.

b) Con el fin de que ajuste los datos proporcionados a una esfera, utilice la expansión encontrada para plantear el sistema a ecuaciones a resolver de tal forma que las incógnitas del sistema sean los valores a, b, c y d (d será un valor que combine a r y a los otros 3 valores).

c) Resuelva el problema de mínimos cuadrados utilizando refelxiones de Householder y obtenga los los valores de a, b, c y r. ¿Cómo queda la ecuación de la esfera calculada?

d) Grafique los puntos y la esfera del ajuste de mínimos cuadrados.

Unidad 5: Vectores y valores propios

1. Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ demuestre que si X es una matriz cuadrada no singular, entonces A y $X^{-1}AX$ tienen el mismo polinomio característico.

2. Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ y sus respectivos valores propios $\lambda_j, j = 1, ..., n$. Demuestre que:
$$det(A) = \prod_{j=1}^{n} \lambda_j$$

3. Realice la implementación del algoritmo 27.3 de la página 207 del libro Numerical linear algebra de Trefethen y Bau. Utilice la matriz del ejemplo 27.1 (página 208) para probar su código.

4. Resuelva el ejercicio 5.29 de la página 254 del libro Scientific computing, an introductory survey de Heath.

   5.29. Newton's method can be used to compute an eigenvalue λ and corresponding eigenvector $\boldsymbol{x}$ of an $n \times n$ matrix $\boldsymbol{A}$. If we define the function $\boldsymbol{f}: \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^{n+1}$ by

   $$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \lambda) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \lambda \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x} - 1 \end{bmatrix},$$

   then $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \lambda) = \boldsymbol{o}$ precisely when λ is an eigenvalue and $\boldsymbol{x}$ is a corresponding normalized eigenvector. Because

   $$\boldsymbol{J}_f(\boldsymbol{x}, \lambda) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I} & -\boldsymbol{x} \\ 2\boldsymbol{x}^T & 0 \end{bmatrix},$$

   Newton's method for solving this equation has the form

   $$\begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_{k+1} \\ \lambda_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_k \\ \lambda_k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{s}_k \\ \delta_k \end{bmatrix},$$

   where $[\, \boldsymbol{s}_k \quad \delta_k \,]^T$ is the solution to the linear system

   $$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A} - \lambda_k \boldsymbol{I} & -\boldsymbol{x}_k \\ 2\boldsymbol{x}_k^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{s}_k \\ \delta_k \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k - \lambda_k \boldsymbol{x}_k \\ \boldsymbol{x}_k^T \boldsymbol{x}_k - 1 \end{bmatrix}.$$

   En este ejercicio se le pide realizar una implementación del método de Newton para el cálculo de valores y vectores propios de una matriz dada A. Un punto inicial de partida podría ser tomar x_0 como un vector cualquiera noramlizado diferente de cero (i.e. $x_0 x_0^T = 1$) y tomar $\lambda_0 = x_0^T A x_0$ ¿Por qué? Probar su programa con algunas matrices aleatorias y comparar su precisión y eficiencia con aquellos métodos convencionales para calcular un solo par de eigenvalor-eigenvector, como el método de la potencia. Notar que el método de Newton no necesariamente converge al eigenvalor dominante.

5. Muestre que los valores propios de una matriz simétrica con coeficientes reales de 2×2 son reales. ¿Cómo quedaría el resultado en general para una matriz simétrica con coeficientes en los reales de $n \times n$?

6. Calcule la descomposición de Schur de la matriz

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

7. Suponga que $A_0 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ es simétrica y positiva definida, y considere la siguiente iteración:

   for k=1,2,...
   $A_{k-1} = G_k G_k^t$ *(Factorización de Cholesky)*
   $A_k = G_k^t G_k$
   end

   muestre que si
$$A_0 = \begin{bmatrix} \mathrm{a} & \mathrm{b} \\ \mathrm{b} & \mathrm{c} \end{bmatrix}$$
   con $a \geq c$, tiene valores propios $\lambda_1 \geq \lambda_2 > 0$, entonces la matriz A_k converge a $diag(\lambda_1, \lambda_2)$

8.