Facultad de Ciencias, UNAM
Semestre 2022-1

ANÁLISIS NUMÉRICO

Práctica No. 3

Ajuste por Mínimos Cuadrados Factorización QR

Prof. César Carreón Otañez
Ayud: Jorge Zavaleta Sánchez
Ayud: Isaí López Servín

Ciudad Universitaria

1. Sea $A \in \mathbb{M}_{m\times n}$ matriz. Bajo qué condiciones en A, la matriz $A^T A$ será

   a) Simétrica.

   b) No-Singular.

   c) Definida Positiva.

2. ¿Cuáles de las siguientes matrices son ortogonales?.

$$a)\ \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad b)\ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \qquad c)\ \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \qquad d)\ \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

3. Una matriz A es involutiva si cumple $A^2 = I$. Sea $\nu^t \nu = 2$, demostrar que la siguiente matriz

$$\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I - \nu\nu^t \end{bmatrix}$$

   es involutiva.

4. ¿Cuáles de las siguientes propiedades tiene una matriz ortogonal $Q \in \mathbb{M}_{m\times m}$?. Demostrar las que se cumplen y dar un contra ejemplo para las que no.

   a) Es no-singular.

   b) Preserva la norma euclidiana, es decir $\|Q\bar{x}\| = \|\bar{x}\|$.

   c) $Q^{-1} = Q^T$.

   d) Sus columnas son ortonormales, es decir, ortogonales entre ellas y de norma 1.

   e) Es simétrica.

   f) Es diagonal.

   g) $\|Q\| = 1$.

   h) $\text{Cond}(Q) = 1$.

5. ¿Cuáles de las siguientes matrices son necesariamente ortogonales?. Dar un ejemplo explícito de cada una, para demostrar que cumplen o no la condición de ortogonalidad.

   a) Matriz de Permutación.

   b) Matriz Simétrica y Definida Positiva.

   c) Matriz de Householder.

   d) Matriz de Givens.

   e) Matriz No-Singular.

   f) Matriz Diagonal.

6. Sea $Q_i \in \mathbb{M}_{m\times m}$ una matriz ortogonal:

   a) Demostrar

$$Q = \prod_{i=1}^{n} Q_i$$

   es ortogonal.

   b) Q_i^{-1} es ortogonal.

7. Se quiere ajustar una línea a los siguientes puntos: $(0,1)$,$(1,2)$,$(3,3)$.

   a) Plantear el problema como un problema a resolver por ajuste de mínimos cuadrados.

   b) Escribir las Ecuaciones Normales.

   c) Resolver el sistema por la Factorización de Cholesky

(Entregar los cálculos escritos).

8. Plantear el problema de mínimos cuadrados $A\bar{x} \approx \bar{b}$ para ajustar a la función $f(t, \bar{x}) = x_1\, t + x_2\, e^t$ para los puntos $(1, 2)$, $(2, 3)$, $(3, 5)$. (Entregar los cálculos escritos).

9. Sea $A \in \mathbb{M}_{m\times n}$ y $\bar{b} \in \mathbb{R}^m$.

    a) ¿Cuáles son las condiciones para que el problema $A\bar{x} \approx \bar{b}$ tenga solución, usando un ajuste por mínimos cuadrados?, argumentar.

    b) Probar que el sistema de Ecuaciones Normales tiene solución única si y sólo si Rango$(A) = n$.

10. Sea $A \in \mathbb{M}_{m\times n}$ tal que Rango$(A) = n$, demostrar que la matriz A^tA es definida positiva.

11. Sea la siguiente matriz
$$\begin{bmatrix} A & B \\ 0 & C \end{bmatrix}$$
ortogonal, donde las submatrices A y C son cuadradas. Probar que A y C deben ser ortogonales y $B = 0$.

12. Si el vector $\nu \neq \bar{0}$ demostrar que la matriz
$$H = I - 2\frac{\nu\nu^t}{\nu^t\nu}$$
es ortogonal y simétrica.

13. Sea $\bar{a} \neq 0$, si $\nu = \bar{a} - \alpha\, \bar{e}_1$, con $\alpha = \pm\|\bar{a}\|_2$ y
$$H = I - 2\frac{\nu\nu^t}{\nu^t\nu}$$
demostrar que $H\bar{a} = \alpha\, \bar{e}_1$

14. Supóngase que se calculará la factorización QR de la siguiente matriz
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \end{bmatrix}$$

    a) ¿Cuántas transformaciones de Householder se requieren para tener la factorización QR?.

    b) ¿Cuántas transformaciones de Givens se requieren para tener la factorización QR?.

    c) ¿Cuántas transformaciones de Gram-schmidt se requieren para tener la factorización QR?.

15. Sea el vector siguiente:
$$\bar{a} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

    a) Mostrar una matriz de eliminación elemental M, tal que la segunda y tercer componente se haga cero luego de multiplicar $M\bar{a}$.

    b) Mostrar la matriz de Householder H para que de la segunda componente hacia abajo se haga cero luego de multiplicar $H\bar{a}$.

    c) Mostrar la matriz de Givens G para que la segunda y tercer componente se haga cero luego de multiplicar $G\bar{a}$.

    d) En general para un vector $\bar{a} \in \mathbb{R}^m$, ¿es posible que M y H sean iguales?, sí, no, por qué.

    e) En general para un vector $\bar{a} \in \mathbb{R}^m$, ¿es posible que H y G sean iguales?, sí, no, por qué.

Dado el sistema $A\bar{x} = \bar{b}$, con

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} ; \ \bar{b} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{1}$$

Para los incisos 16-19 resolver (explícitamente) por:

16. Triangulación $MR = A$.
17. Ecuaciones Normales $A^t A\bar{x} = A^t \bar{b}$.
18. Transformada de Householder $QR = A$.
19. Rotación de Givens $QR = A$.
20. M etodo de Gram-Schmidt $QR = A$.
21. Comparar todos los resultados calculando.

$$\|\bar{b} - \widetilde{b}_i\|$$

donde $A\widetilde{x}_i = \widetilde{b}_i$ con $\widetilde{x}_i$ la solución a cada uno de los incisos anteriores.

22. Calcular para la matriz en el sistema de (1):

    a) Cond(A) y decir si es bien o mal condicionada.

    b) Para cada $\widetilde{b}_i$ obtenida en los incisos 16-19, calcular

    $$\frac{1}{\cos(\theta_i)}$$

    donde θ_i es el ángulo que forman $\bar{b}_i$ con $A\widetilde{x}_i$.

Problemas Computacionales

23. *a*) Resolver el siguiente problema de mínimos cuadrados usando cualquier método de los vistos en clase.

    $$\begin{bmatrix} 0.16 & 0.10 \\ 0.17 & 0.11 \\ 2.02 & 1.29 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.26 \\ 0.28 \\ 3.31 \end{bmatrix}$$

    b) Resolver el mismo problema con la siguiente perturbación en el vector $\bar{b}$,

    $$\bar{b} = \begin{bmatrix} 0.27 \\ 0.25 \\ 3.33 \end{bmatrix}$$

    c) Compara los resultados de los incisos anteriores, ¿se puede explicar la diferencia entre ellos?.

24. Ejercicio 3.5. Heath M. SCIENTIFIC COMPUTING páginas 153-154. Incisos a) y b).
25. Para mostrar la diferencia numérica entre el método de las Ecuaciones Normales y la factorización QR se requiere un problema de mínimos cuadrados que sea mal condicionado. Para ello consideremos el ajuste del siguiente polinomio de grado $n-1$,

    $$p_{n-1}(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2 + \cdots + x_n t^{n-1}$$

    para m datos (t_i, y_i), $m > n$. Elegimos $t_i = (i-1)/(m-1)$, $i = 1, \cdots, m$. Los valores para y_i serán los dados al evaluar el polinomio con las t_i dadas previamente y tomando $x_j = 1$ para $j = 1, \cdots, n$, se quiere ver si se pueden recuperar los valores de las x_j con los métodos estudiados.

Primero se genera un perturbación para los valores y_i dado por

$$y_i = y_i + (2u_i - 1) * \epsilon, \quad i = 1, \cdots, m$$

con $u_i \in [0,1]$ números aleatorios. Usar $m = 21, n = 12$ y $\epsilon = 10^{-10}$.

Después de generar la lista de datos (t_i, y_i) se comparan los dos métodos para ajustar el polinomio. Primero, formar el Sistema de Ecuaciones Normales para el problema y resolverlo por la Factorización de Cholesky.[1] Segundo utilizar algún método para factorizar la matriz en una QR y resolver.

a) ¿Para cuál de los métodos la solución es más sensible a la perturbación generada?.

b) ¿Cuál de los métodos está más proximo a tener la solución exacta dada por $x_i = 1$?.

c) ¿La diferencia en las soluciones afecta en el ajuste de puntos (t_i, y_i) por el polinomio, por qué?.

Argumentar todas las respuestas con los resultados de ambos métodos.

26. Resolver

a) Implementar los métodos de Gram-Schmidt Clásico y Modificado para generar la matriz ortogonal Q cuyas columnas forman una base ortogonal para el espacio columna de la Matriz H de Hilbert cuyas entras están dadas por

$$h_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, \quad n = 2, \cdots, 12$$

Como medida de calidad en los resultados (específicamente la perdida de ortogonalidad), graficar la cantidad

$$-\log_{10}(\|I - Q^tQ\|) \tag{2}$$

la cual puede ser interpretada como los "dígitos de precisión", para cada método como función de n.

Como tercer método de comparación, dada la matriz Q obtenida del procedimiento Clásico de Gram-Schmidt, volver a calcular una nueva Q con la anterior, es decir, aplicar dos veces el método clásico. Graficar con (2) la medida de ortogonalidad creada.

¿Cómo pueden compararse los tres métodos en rapidez, almacenamiento y exactitud?.

b) Repetir a) usando la factorización de Householder para poner $H = QR$. Calcular la cantidad pedida en la ecuación (2) y comparar nuevamente con los dos anteriores.

c) Una manera de calcular una base ortogonal es usando las ecuaciones normales. Al formar la matriz de las ecuaciones normales y calcular su factorización de Cholesky $A^tA = LL^t$, tenemos

$$I = L^{-1}(A^tA)L^{-T} = (AL^{-t})^t(AL^{-t})$$

es decir, $Q = AL^t$ es ortogonal y su espacio columna es el mismo que el de A. Repetir el procedimiento anterior usando la matriz Q obtenida arriba. Graficar los resultados comparando con los obtenidos por Gram-Schmidt.

d) ¿Se puede dar una explicación de la calidad de los resultados obtenidos por los distintos métodos?.

27. ¿Cuál es la solución exacta al problema de mínimos cuadrados como función de ϵ para el siguiente sistema?:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

[1] Usar la rutina realizada en el proyecto pasado.

Resolver el problema de mínimos cuadrados usando cada usando cada uno de los métodos listados. Para cada método variar el valor de ϵ tan pequeño como se pueda hasta obtener una solución exacta. Probar explícitamente valores cercanos a

$$\epsilon \approx \sqrt{\epsilon_m} \quad \wedge \quad \epsilon \approx \epsilon_m$$

Mostrar al menos 3 valores de ϵ para los cuales se aplicaron las pruebas.

a) Método de Ecuaciones Normales.

b) Factorización QR de Householder.

c) Factorización QR de Givens.

d) Ortogonalización Gram-Schmidt Clásico.

Número de integrantes: a lo más 4.

Formato de Entrega:

- Los ejercicios correspondientes a la primera parte, deberán ser escaneados o fotografiados y anexar todo en un archivo pdf con imágenes nítidas. Cualquier hoja que no tenga una vista nítida no será calificada.
- Cada programa realizado debe llevar comentarios, estar indentados y tener los nombres del/los creador/es, el nombre del archivo debe coincidir con el número del ejercicio (p.e: ejercicio22.***).
- **Si se llegan a encontrar códigos iguales se anulara la calificacin de todos lo integrantes en el tema correspondiente**.

Fecha de Entrega: **10 Diciembre**.