Curso de Métodos Numéricos (DEMAT)

Tarea 7

Descripción:	Fechas
Fecha de publicación del documento:	**Octubre 6, 2023**
Fecha límite de entrega de la tarea:	**Octubre 16, 2023**

Indicaciones

Puede escribir el código de los algoritmos que se piden en una celda de este notebook o si lo prefiere, escribir las funciones en un archivo `.py` independiente e importar la funciones para usarlas en este notebook. Lo importante es que en el notebook aparezcan los resultados de la pruebas realizadas y que:

- Si se requieren otros archivos para poder reproducir los resultados, para mandar la tarea cree un archivo ZIP en el que **incluya el notebook** y los archivos adicionales.
- Si todos los códigos que se requieren para reproducir los resultados están en el notebook, no hace falta comprimir el notebook y puede anexar este archivo en la tarea del Classroom.
- Exportar el notebook a un archivo PDF y anexarlo en la tarea del Classroom como un archivo independiente. **No incluya el PDF dentro del ZIP**, porque la idea que lo pueda accesar directamente para poner anotaciones y la calificación de cada ejercicio.

Ejercicio 1 (5 puntos)

Resolver el poblema de mínimos cuadrados lineales para ajustar un plano $c_0 + c_1 x_1 + c_2 x_2$ a un conjunto de datos

$$\{(x_{11}, x_{12}, y_1), (x_{21}, x_{22}, y_2), (x_{31}, x_{32}, y_3), \ldots, (x_{m1}, x_{m2}, y_m)\},$$

de modo que $y_i = c_0 + c_1 x_{i1} + c_2 x_{i2} + \epsilon_i$, para $i = 1, 2, \ldots, m$.

1. Escriba la matriz $\mathbf{A}$ que corresponde al problema de minimización

$$\min_x \|\mathbf{A}\mathbf{c} - \mathbf{y}\|_2^2,$$

donde

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad \text{y} \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}.$$

2. Escriba una función que calcule la solución del problema de mínimos cuadrados. Aplique la factorización de Cholesky para resolver el sistema de ecuaciones $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{A}^\top \mathbf{y}$.

Entradas de la función:

- La matriz $\mathbf{A}$,
- El arreglo $\mathbf{y}$,

Salida de la función:

- La función debe devolver el arreglo $\mathbf{c}$ de la solución del problema de minimos cuadrados o `None` si no se pudo obtenerla.
- El valor la raíz cuadrada del error cuadrático medio (RMSE). Para calcular esto puede usar la implementación de Python vista en la Ayudantía 6 o calcular $y_{pred,i} = c_0 + c_1 x_{i1} + c_2 x_{i2}$ para $i = 1, 2, \ldots, m$ y programar la fórmula

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{m}(y_i - y_{pred,i})^2}{m}}.$$

3. Probar el algoritmo usando los arreglos de datos `D1` y `D2` que se generan en las celdas que aparecen más adelante. Estos arreglos son de la forma

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & y_1 \\ x_{21} & x_{22} & y_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & y_m \end{bmatrix}$$

Use la información en estos arreglos para definir la matriz $\mathbf{A}$ y el arreglo $\mathbf{y}$.

Si el problema de mínimos cuadrados tiene solución, imprima la solución y valor del RMSE.

¿Se parecen los valores estimados de los coeficientes c_i estimados a los verdaderos valores de los coeficientes que se usaron para generar los datos cuando se tienen más datos o menos datos?

Solución:

En este caso la matriz se A se se como

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} \\ 1 & x_{12} & x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1m} & x_{2m} \end{bmatrix}$$

Primero cremos las funciones, despues grafiquemos y hagamos las pruebas.

```
## Funciones de la tarea 4
import numpy as np

def forwardSubstitution(L: np.ndarray, b: np.ndarray, t):
  d = L.shape[0]
  res = np.zeros(d)
  for i in range(d):
    sum = np.dot(res[:i], L[i, :i])
    if np.abs(L[i, i]) <= t:
        print(L[i, i])
        return None
    x = (b[i] - sum)/L[i, i]
    res[i] = x

  return res

def backwardSubstitution(U: np.ndarray, b: np.ndarray, t):
    d = U.shape[0]
    res = np.zeros(d)
    for i in reversed(range(d)):
        sum = np.dot(res[i:], U[i, i:])
        if abs(U[i, i]) < t:
            print(U[i, i], t)
            return None
        x = (b[i] - sum)/U[i, i]
        res[i] = x
    return res

```

```
import numpy as np

def factchol(A: np.ndarray, t:float):
    L = np.zeros(A.size).reshape(A.shape)
    for i in range(A.shape[0]):
        if (r := A[i, i] - sum(L[i, :i]**2)) < 0 or abs(np.sqrt(r)) < t:
            return None
        L[i, i] = np.sqrt(r)
        for j in range(i+1, A.shape[0]):
            L[j, i] = (A[j, i]- L[j,:i].dot(L[i, :i]))/L[i, i]
    return L


```

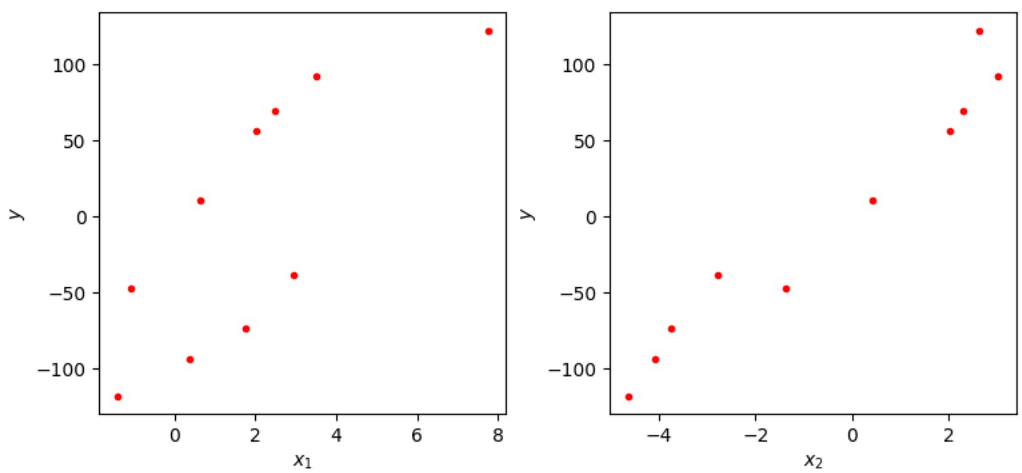
```
def SolveCholesky(A: np.ndarray, b:np.ndarray, t):
    if (L := factchol(A, t)) is not None:
        y = forwardSubstitution(L, b, t)
        x = backwardSubstitution(L.T, y, t)
        return x
```

```
# Celda para importar o programar la función que resuelve el problema de mínimos cuadrados

def solveLSM(A: np.ndarray, y:np.ndarray):
    """Resulve el problema de minimos cuadrados al resolver A.TAc = A.Ty para c"""
    b = A.T @ y
    A = A.T @ A
```

```
    t = np.finfo(float).eps**(2/3)
```

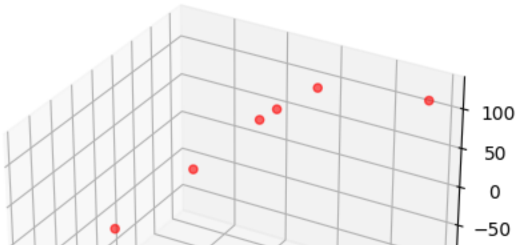
```
def RMSE(y: np.ndarray, yp:np.ndarray):
    m = y.size
    return np.sqrt((y-yp)@(y-yp)/m)
```

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib  inline

# Verdaderos coeficientes del modelo generador
c0 = -4
c1 = 9
c2 = 22

# Cantidad de datos
m  = 10

np.random.seed(12)
x1 = 2*np.random.randn(m) + 2
x2 = 3*np.random.randn(m) - 1
y  = c0 + c1*x1 + c2*x2 + 1.5*np.random.randn(m)

fig, ax = plt.subplots(1,2,figsize=(8,4))
fig.tight_layout(pad=2.5)
ax[0].plot(x1, y, 'r.')
ax[0].set_xlabel(r'$x_1$')
ax[0].set_ylabel(r'$y$')

ax[1].plot(x2, y, 'r.')
ax[1].set_xlabel(r'$x_2$')
ax[1].set_ylabel(r'$y$')

D1 = np.zeros((m,3))
D1[:,0] = x1
D1[:,1] = x2
D1[:,2] = y
```




```
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

fig = plt.figure(figsize = (5, 5))
ax  = plt.axes(projection = '3d')
ax.scatter3D(x1, x2, y, marker='o', c="red", alpha=0.6)
ax.set_xlabel(r'$x_1$')
ax.set_ylabel(r'$x_2$')
ax.set_zlabel(r'$y$')
```

```
Text(0.5, 0, '$y$')
```



Double-click (or enter) to edit

Aqui hacemos las pruebas

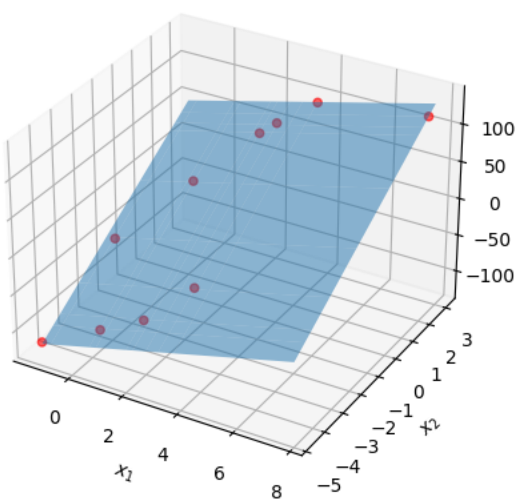
```
A  = np.ones((m,3))
A[:, 1] = x1
A[:, 2] = x2
c = solveLSM(A, y)
yp = c[0] + c[1]*x1 + c[2]*x2
c, RMSE(y, yp)
```

```
(array([-5.30934748,  9.07065845, 22.01463727]), 1.65267433005298)
```

Ahora graficamos el plano.

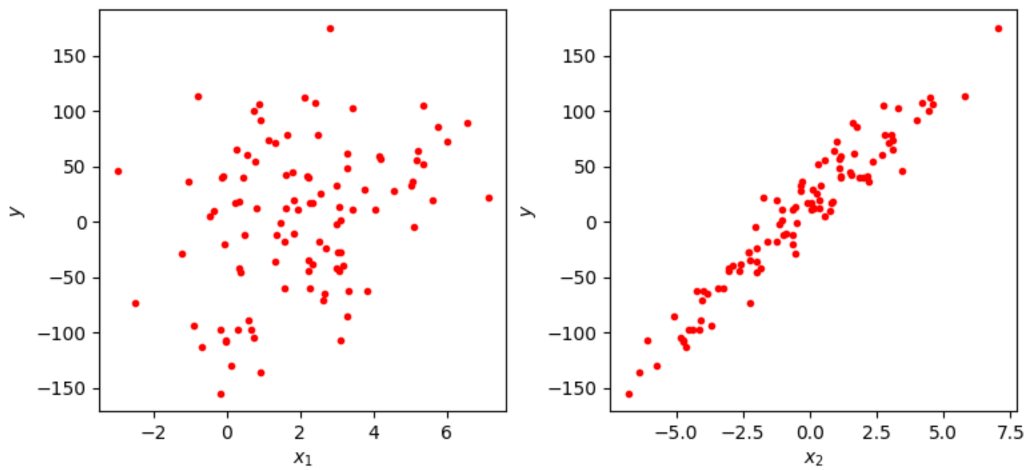
```
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

fig = plt.figure(figsize = (5, 5))
ax  = plt.axes(projection = '3d')
ax.scatter3D(x1, x2, y, marker='o', c="red", alpha=0.6)
ax.set_xlabel(r'$x_1$')
ax.set_ylabel(r'$x_2$')
ax.set_zlabel(r'$y$')

# geeneramos una malla de puntos
x1 = np.sort(x1)
x2 = np.sort(x2)
XX, YY = np.meshgrid(x1, x2)
z = c[0] + c[1]*XX + c[2]*YY
ax.plot_surface(XX, YY, z, alpha=0.5)

```

```
<mpl_toolkits.mplot3d.art3d.Poly3DCollection at 0x7b48e263d840>
```



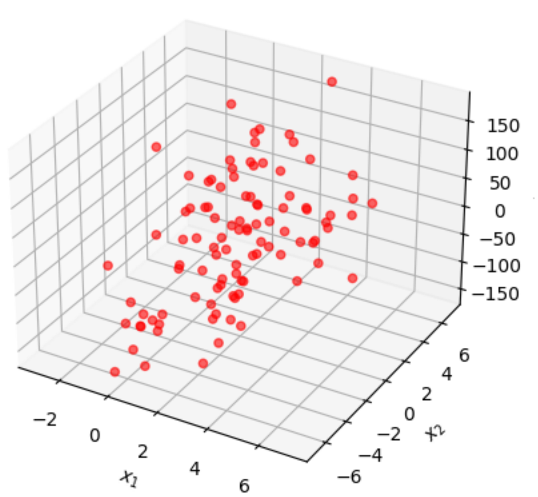

```
c0 = -4
c1 = 9
c2 = 22


```

```
m  = 100


np.random.seed(16)
x1 = 2*np.random.randn(m) + 2
x2 = 3*np.random.randn(m) - 1
y  = c0 + c1*x1 + c2*x2 + 1.5*np.random.randn(m)


fig, ax = plt.subplots(1,2,figsize=(8,4))
fig.tight_layout(pad=2.5)
ax[0].plot(x1, y, 'r.')
ax[0].set_xlabel(r'$x_1$')
ax[0].set_ylabel(r'$y$')

ax[1].plot(x2, y, 'r.')
ax[1].set_xlabel(r'$x_2$')
ax[1].set_ylabel(r'$y$')

D2 = np.zeros((m,3))
D2[:,0] = x1
D2[:,1] = x2
D2[:,2] = y
```




```
fig = plt.figure(figsize = (5, 5))
ax  = plt.axes(projection = '3d')
ax.scatter3D(x1, x2, y, marker='o', c="red", alpha=0.6)
ax.set_xlabel(r'$x_1$')
ax.set_ylabel(r'$x_2$')
ax.set_zlabel(r'$y$')
```

```
Text(0.5, 0, '$y$')
```



Aqui hacemos lo mismo

```
# Celda para las pruebas
A = np.ones((m, 3))
A[:, 1] = x1
A[:, 2] = x2

c = solveLSM(A, y)
yp = c[0] + c[1]*x1 + c[2]*x2
c, RMSE(y, yp)

```

```
(array([-4.18311214,  8.9992974 , 21.97480595]), 1.1984504505763716)
```

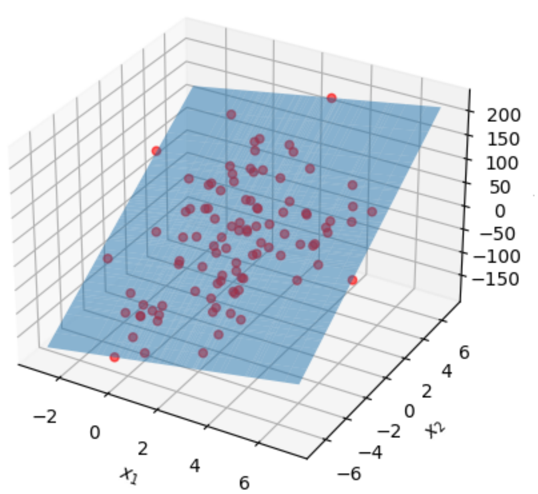
Respuesta a la pregunta

De lo anterior, podemos notar que mientras más datos el error se reduce, pues el $RMSE$ es menor.

Además eso tiene sentido, pues al tener mas datos, como el ruido viene de una distribución uniforme, por la ley de grandes numero su promedio converge a su media la cual es cero.

```
fig = plt.figure(figsize = (5, 5))
ax  = plt.axes(projection = '3d')
ax.scatter3D(x1, x2, y, marker='o', c="red", alpha=0.6)
ax.set_xlabel(r'$x_1$')
ax.set_ylabel(r'$x_2$')
ax.set_zlabel(r'$y$')
# geeneramos una malla de puntos
x1 = np.sort(x1)
x2 = np.sort(x2)
XX, YY = np.meshgrid(x1, x2)
z = c[0] + c[1]*XX + c[2]*YY
ax.plot_surface(XX, YY, z, alpha=0.5)

```

```
<mpl_toolkits.mplot3d.art3d.Poly3DCollection at 0x7b48e2149ab0>
```



Ejercicio 2 (5 puntos)

Resolver el poblema de mínimos cuadrados lineales para ajustar un polinomio $p(x) = c_0 + c_1x_1 + c_2x_2 + \ldots + c_nx^n$ a un conjunto de datos

$$\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \ldots, (x_m, y_m)\},$$

de modo que $y_i = p(x_i) + \epsilon_i$, para $i = 1, 2, \ldots, m$.

1. Escriba la matriz $\mathbf{A}$ que corresponde al problema de minimización

$$\min_x \|\mathbf{Ac} - \mathbf{y}\|_2^2,$$

donde $\mathbf{Ac}$ es igual al arreglo que tiene los valores $(p(x_1), p(x_2), \ldots, p(x_m))$ y

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}, \quad \text{y} \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}.$$

2. Escriba una función que calcule la solución del problema de mínimos cuadrados. Aplique la factorización de Cholesky para resolver el sistema de ecuaciones $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{A}^\top \mathbf{y}$.

Entradas de la función:

- La matriz $\mathbf{A}$,
- El arreglo $\mathbf{y}$.

Salida de la función:

- La función debe devolver el arreglo $\mathbf{c}$ de la solución del problema de minimos cuadrados o `None` si no se pudo obtenerla.
- El valor la raíz cuadrada del error cuadrático medio (RMSE).

3. Probar el algoritmo usando el arreglo de datos `D3` que se genera en una siguiente celda.

   Use la información en estos arreglos para definir la matriz $\mathbf{A}$ y el arreglo $\mathbf{y}$.

   Si el problema de mínimos cuadrados tiene solución, imprima la solución y el valor del RMSE usando polinomios de grado $n = 1, 2, 3, 4, 5$

4. Escriba una función que genera una gráfica que muestre los datos y la gráfica del polinomio para apreciar el ajuste del modelo polinomial. Genere las gráficas para los polinomios de grado $n = 1, 2, 3, 4, 5$.

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \\ \vdots & \vdots \\ x_m & y_m \end{bmatrix}$$

Nota

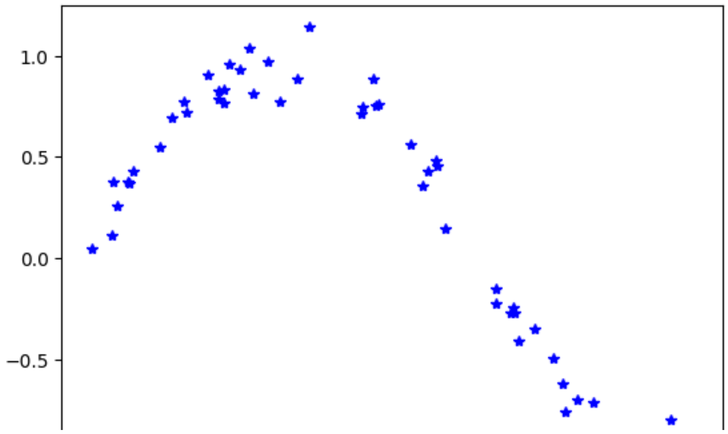
Para generar la gráfica, puede seguir las notas de la ayudantía 6:

- Calcule el valor mínimo $x_{\min}$ y el valor máximo $x_{\max}$ de los valores x_i.
- Genere una partición $\{z_1, z_2, \ldots, z_r\}$ del intervalo $[x_{\min}, x_{\max}]$.
- Use un valor de r como 100 para que se genere una cantidad suficiente de puntos de modo que al graficarlos se vea una curva suave.
- Como los coeficientes del modelo ya son conocidos, para evaluar el polinomio en cada punto z_j se puede crear una matriz $\mathbf{B}$ similar a la matriz $\mathbf{A}$ usada para calcular los coeficientes, solo que en lugar de usar los valores $\{x_i\}$ se usan los valores $\{z_j\}$.

  El producto $\mathbf{B}\mathbf{c}$ es igual al arreglo $(p(z_1), p(z_2), \ldots, p(z_r))$. Con el arreglo $\{z_1, z_2, \ldots, z_r\}$ y $(p(z_1), p(z_2), \ldots, p(z_r))$ se puede generar la gráfica del polinomio.

Solución:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib  inline

# Cantidad de datos
m = 50

# Generacion de datos
np.random.seed(16)
x = 5*np.random.rand(m)
y = np.sin(x) + 0.1*np.random.randn(m)

plt.plot(x, y, 'b*')

D3 = np.zeros((m,2))
D3[:,0] = x
D3[:,1] = y
```



Notemos que el procedimiento es el mismo para este caso que para el caso de un plano, lo unico que cambia es la matriz A.

Por ello creemos una función que genere la matriz A dado los datos y el grado del polinomio al cual queremos aproximar.

```
# Celda para importar o programar la función que resuelve el problema de mínimos cuadrados
# y la que genera la gráfica del modelo

def matrizOfCoeffients(X: np.ndarray, n:int):
    return np.array([[x**i for i in range(n+1)] for x in X])

def polinomialAprox(x:np.ndarray, y:np.ndarray, n:int):
    """Creates """
    A = matrizOfCoeffients(x, n)
    t = np.finfo(float).eps**(2/3)
    return solveLSM(A.T@A, A.T@y)

def plotPolinomial(x: np.ndarray, y: np.ndarray, n:int):
    c = polinomialAprox(x, y, n)
    if c is None:
        return None
    xmin = min(x)
    xmax = max(x)
    z = np.linspace(xmin, xmax, 100)
    # yp = sum([c[i]*z**i for i in range(n+1)])
    B = matrizOfCoeffients(z, n)
    yp = B@c
    plt.plot(z, yp, label=f"Pol de grado {n}")


```

```
# Pruebas

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib  inline

# Cantidad de datos
m = 50

# Generacion de datos
np.random.seed(16)
x = 5*np.random.rand(m)
y = np.sin(x) + 0.1*np.random.randn(m)

plt.plot(x, y, 'b*')

D3 = np.zeros((m,2))
D3[:,0] = x
D3[:,1] = y

## Aqui ploteamos para cada grado de 1 a 5
for i in range(1, 6):
    plotPolinomial(x, y, i)
plt.legend()
```

```
<matplotlib.legend.Legend at 0x7b48e201cd90>
```