¿Qué nos queda por ver en ajuste?

El caso básico lo tenemos cubierto (y desde el punto de vista de su resolución en MATLAB es prácticamente idéntico a lo que hicimos en la interpolación).

Estudiaremos algunas variantes del problema de ajuste básico:

A) El ajuste no se plantea con funciones del tipo $u(t) = \sum_{k=1}^{n} c_k b_k(t)$

¿Cómo resolver un mejor ajuste con una función del tipo $u(t) = Ae^{\beta t}$?

B) Ajuste con restricciones: el problema tiene una mezcla de condiciones estrictas (hay que cumplirlas de forma exacta) y otras aproximadas. Mezclamos aspectos de interpolación (estamos obligados a pasar por ciertos puntos) y de ajuste (nos basta con pasar cerca de los otros).

C) USO de PESOS: sin llegar al caso anterior de tener algunas condiciones exactas, es posible que ciertos datos sean más importantes que otros (p.e. han sido tomados por un observador más experimentado).
¿Cómo reflejar esa diferencia de calidades en el ajuste?

B) Condiciones previas

Algunos problemas tienen condiciones con distintas prioridades:

- Condiciones "exactas" que hay que cumplir si o si (como en interpolación)
- Condiciones "aproximadas" (nos conformaremos con "pasar" cerca)

Método de resolución:

1. Imponer primero condiciones exactas (con igualdades).

   Se reduce el número de parámetros: si p.e. hay dos condiciones a cumplir, dos de los coeficientes iniciales quedarán determinados o relacionados con otros.

1. Plantear el problema de aproximación en el resto de condiciones.

   Obtendremos un sistema sobredeterminado sobre los el resto de coeficientes.

Problema 4: ejemplo con condiciones previas

Hallar la parábola que verifique p(0)=0 , p'(0)=0 y que mejor ajuste, en el sentido de mínimos cuadrados, los datos de la tabla:

xk	1	2	3
yk	1	5	10

Polinomio inicial (grado 2): $p(x) = a + bx + cx^2$

Imponemos condiciones previas: $p(0) = a = 0$, $p'(0) = b = 0$ $\longrightarrow p(x) = cx^2$

Como problema de interpolación nos sobra un coeficiente :

→ solución múltiple.

→ de entre ellas, elegir el mejor ajuste a los datos de la tabla.

Problema 4

Ahora basta ajustar la tabla

1	2	3
1	5	10

con funciones del tipo p(x)=x².

Sistema sobredeterminado: $H \cdot \bar{c} = \bar{v} \Rightarrow \left(x_k^2 \right) c = \left(y_k \right) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 9 \end{pmatrix} \cdot c = \begin{pmatrix} 1 \\ 5 \\ 10 \end{pmatrix}$

Ecuaciones normales:

$$H^T H = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 9 \end{pmatrix} = 98 \quad H^T \cdot v = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 5 \\ 10 \end{pmatrix} = 111$$

$$98 \cdot c = 111 \rightarrow c = \frac{111}{98} = 1.1327, \quad \boxed{p(x) = 1.1327 \cdot x^2}$$

Alternativamente en MATLAB **`c = H\v = 1.1327`**.

Un poco más complicado: problema 5

Polinomio de grado 3 que mejor ajusta la tabla:

tk	-1	1	2	3	4
fk	4	2	1	1	2

y verifica que p′(0)=-1 y p″(1)=0.

$$p(t) = a + bt + ct^2 + dt^3 \quad \begin{cases} p'(t) = b + 2ct + 3dt^2 \\ p''(t) = 2c + 6dt \end{cases}$$

Condiciones a verificar de forma exacta:

$$p'(0) = b = -1 \qquad b = -1$$
$$p''(1) = 2c + 6d = 0 \qquad c = -3d$$

Como esperábamos desaparecen dos parámetros (b tiene que ser -1 y c es dependiente de d), luego el polinomio queda:

$$p(t) = a - t - 3dt^2 + dt^3$$

Sobre esta función se plantea el problema de ajuste a la tabla:

→ 2 parámetros libres (a,d) para ajustar 5 condiciones.

Problema 5

Problema de ajuste: $y_k \approx a - t_k - 3dt_k^2 + dt_k^3$ para $\{t_k, y_k\}$ en tabla

Hay algunas (pequeñas) diferencias con el caso habitual:

- Tenemos en el lado derecho un par de términos con el parámetro d.

  SOLUCIÓN: agrupar todos los términos que lleven el parámetro d

- Tenemos un término t_k suelto SIN coeficiente libre (su coeficiente era b y quedó fijado como b = -1 para cumplir las condiciones previas)

  SOLUCIÓN: como t_k es conocido, pasarlo al lado de los datos (izqda.)

$$(y_k + t_k) \approx a + d\left(t_k^3 - 3t_k^2\right)$$

El problema de ajuste queda como:

"NUEVOS" DATOS: $\{y_k + t_k\}$ BASE a USAR: $\{ 1 , t^3-3t^2\}$

Problema 5) Sistema a resolver y solución

Matriz H **Vector b**

$$\begin{pmatrix} 1 & t_1^3-3t_1^2 \\ 1 & t_2^3-3t_2^2 \\ 1 & t_3^3-3t_3^2 \\ \dots & t_4^3-3t_4^2 \\ 1 & t_5^3-3t_5^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} y_1+t_1 \\ y_2+t_2 \\ y_3+t_3 \\ y_4+t_4 \\ y_5+t_5 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & -4 \\ 1 & -2 \\ 1 & -4 \\ 1 & 0 \\ 1 & 16 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix} \to \begin{array}{l} a = 3.6180 \\ d = 0.1517 \end{array}$$

$$\uparrow \quad \uparrow$$

$$1 \qquad t^3-3t^2$$

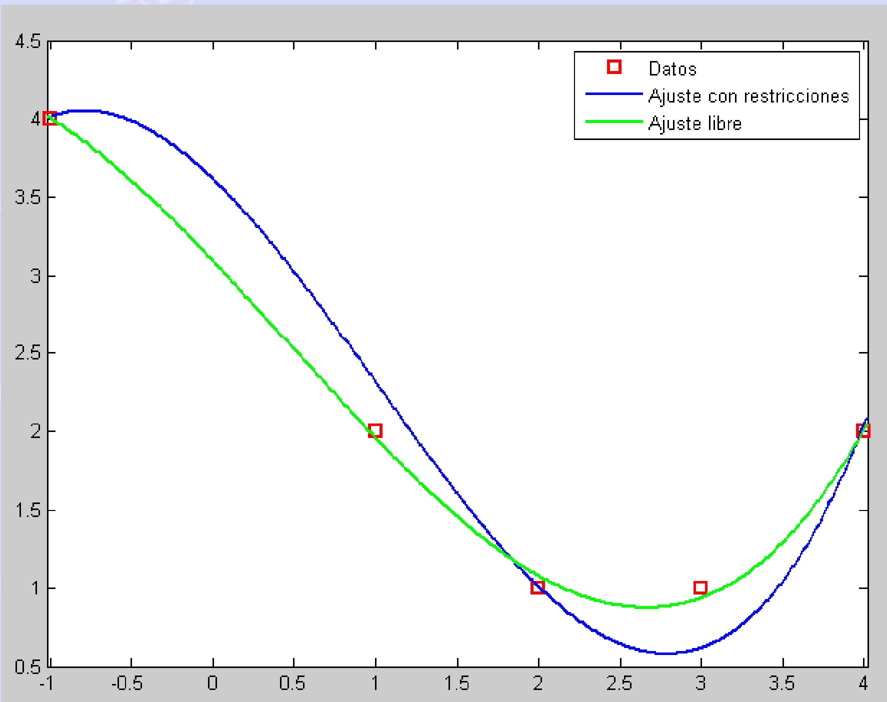
La solución es $p(t)=a+b\cdot t+c\cdot t^2+d\cdot t^3$ con:

$a = 3.6180$, $d = 0.1517$ — Ajuste a la tabla

$b = -1$ — $p'(0)=-1$

$c = -3d = -0.4551$ — $p''(1)=0$

Problema 5) Gráficas



res1 = -0.0112
-0.3146
-0.0112
0.3820
-0.0449
norm = 0.4972

res2 = -0.0040
0.0404
-0.0809
0.0606
-0.0162
norm = 0.1101

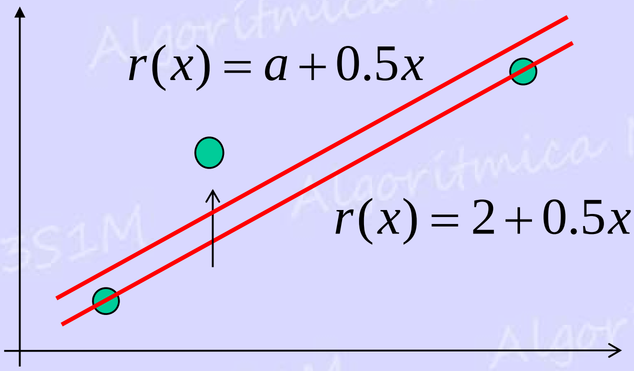
Problema 9 (examen)

Hallar la recta y=a+bx que pasa por (2,3) y (6,5) (interpolación)

$$\begin{matrix} a+2b=3 \\ a+6b=5 \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} a+1=3 \\ 4b=2 \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} a=2 \\ b=0.5 \end{matrix} \rightarrow r(x)=2+0.5x$$

a) ¿Cuánto debe desplazarse (sin cambiar su pendiente) esta recta para obtener la que mejor se aproxima (por mínimos cuadrados) a los puntos anteriores y al punto adicional (3,4)?

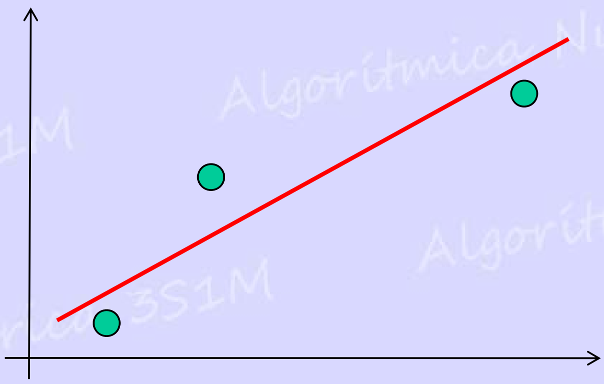
¿Dimensión del sistema sobredeterminado planteado?



Problema 9

a) Hallar $r(x)=a+0.5x$ que mejor ajuste la tabla:

xk	2	3	6
yk	3	4	5



$$y_k \approx r(x_k)=a+0.5x_k$$
$$y_k - 0.5x_k \approx a$$

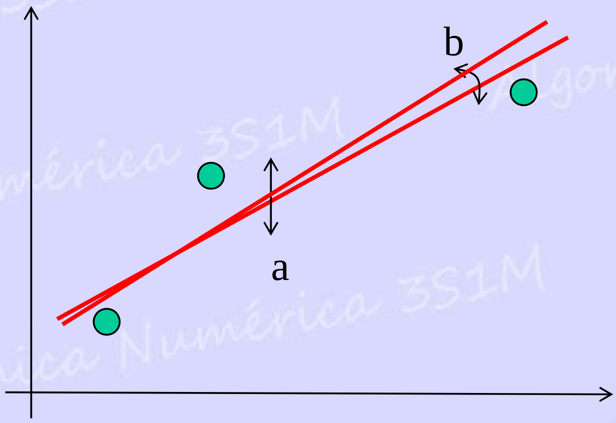
$$\longrightarrow \begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}\cdot a = \begin{pmatrix} \\ y_k - 0.5x_k \\ \\ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix}2\\2.5\\2\end{pmatrix}$$

$$a=\frac{6.5}{3}=2.1666$$

Problema 9

b) ¿Coincide la recta anterior con la recta mejor aproximación a los tres puntos dados?

Dar el nuevo sistema sobredeterminado. ¿Dimensiones?



$$a + bx_k = r(x_k) \approx y_k$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 5 \end{pmatrix}$$

$$a = 2.3077$$

$$b = 0.4615$$

Problema 7 (ajuste con condiciones previas)

Se desea construir una autopista entre las ciudades A (0,0) y B(5,0).

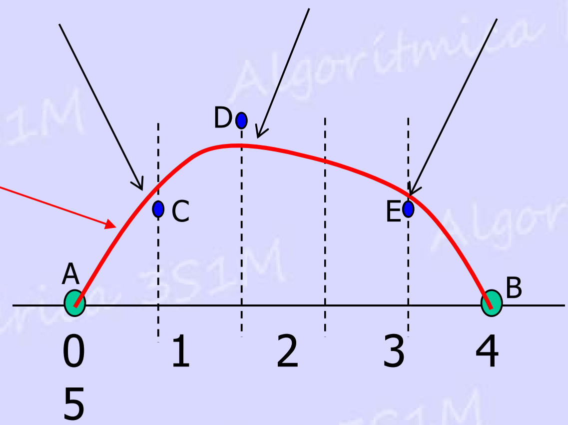
El trazado en planta de la vía debe ser una función de la forma:

$$f(x) = a + bx + cx^2 + dx^3$$

a) Se desea que la autopista pase cerca de los pueblos C(1,1), D(2,2) Y E (4,1), por lo que el trazado de la vía debe minimizar la cantidad:

$$S = d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 = (f(1)-1)^2 + (f(2)-2)^2 + (f(4)-1)^2$$

$$f(x) = a + bx + cx^2 + dx^3$$



Problema 7

Condiciones "estrictas" a cumplir: pasar por A (0,0) y B(5,0).

$$f(0) = a = 0 \qquad\qquad a = 0$$

$$f(5) = a + 5b + 25c + 125d = 0 \longrightarrow b = -5c - 25d$$

La expresión más general de f(x) con las restricciones anteriores queda

$$f(x) = (-5c - 25d)x + cx^2 + dx^3 = c \cdot \left(x^2 - 5x\right) + d\left(x^3 - 25x\right)$$

¿Minimizar la distancia S? $S = (f(1)-1)^2 + (f(2)-2)^2 + (f(4)-1)^2$

OPCIÓN A) Escribir la expresión S(c,d) y derivar:

$$f(1) = -4c - 24d \longrightarrow S = (-4c - 24d - 1)^2 + (-6c - 42d - 2)^2 + (-4c - 36d - 1)^2$$

$$f(2) = -6c - 42d$$

$$f(4) = -4c - 36d \qquad \frac{\partial S}{\partial c} = \ldots = 0, \qquad \frac{\partial S}{\partial d} = \ldots = 0$$

Problema 7

OPCION B)

Darse cuenta de que minimizar la distancia S es equivalente a ajustar la tabla adjunta con mínimos cuadrados

x	1	2	4
f	1	2	1

$$S = (f(1)-1)^2 + (f(2)-2)^2 + (f(4)-1)^2$$

usando una función del tipo: $f(x) = c\cdot(x^2-5x) + d(x^3-25x)$

Este es nuestro típico problema de mínimos cuadrados.

Problema 7

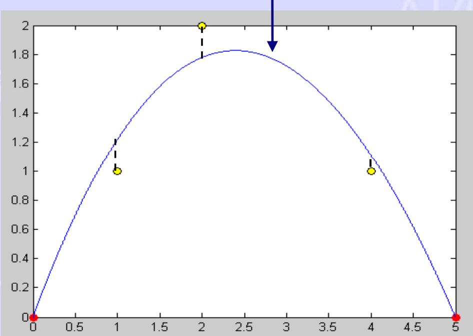
Hallar $f(x) = c\cdot(x^2-5x) + d(x^3-25x)$ que mejor ajuste la tabla

x	1	2	4
f	1	2	1

$$\underset{\substack{\uparrow \qquad\quad \uparrow \\ (x^2-5x)\quad (x^3-25x)}}{\begin{pmatrix} -4 & -24 \\ -6 & -42 \\ -4 & -36 \end{pmatrix}} \cdot \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \boxed{\begin{matrix} c = -0.3611 \\ d = 0.0093 \end{matrix}} + \boxed{\begin{matrix} a = 0 \\ b = -5c - 25d = 1.574 \end{matrix}}$$

Ajuste — Condiciones previas

$$f(x) = 1.574\cdot x - 0.3611\cdot x^2 + 0.0093\cdot x^3$$



H·c = 1.2222
1.7778
1.1111

res = v – H·c = - 0.222
0.222
- 0.111

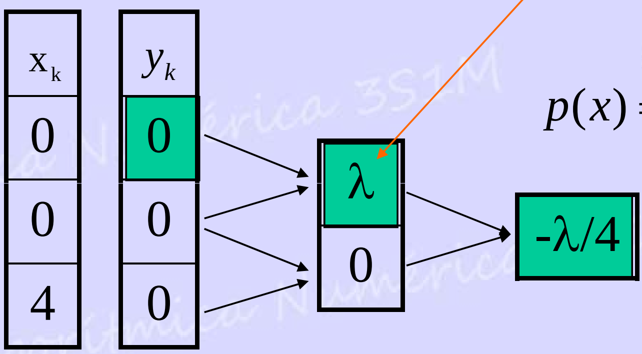
Problema 8 (condiciones previas)

Hallar el polinomio de grado 2 que pasa por los puntos (0,0) y (4,0) y cuya derivada en el origen es λ. Usar método de Newton

Determinar el miembro de la familia anterior (calcular el valor de λ) que mejor ajusta (por mínimos cuadrados) la tabla siguiente:

xk	1	2	3
yk	1	2	1

Polinomio grado 2 con p(0)=0, p'(0)= λ, p(4)=0 usando Newton:



$$p(x) = 0 + \lambda x - \frac{\lambda}{4}x^2 = \lambda \cdot \left(x - \frac{x^2}{4} \right)$$

Problema 8

Determinar el miembro de la familia anterior (calcular el valor de λ) que mejor ajusta (por mínimos cuadrados) la tabla siguiente:

xk	1	2	3
yk	1	2	1

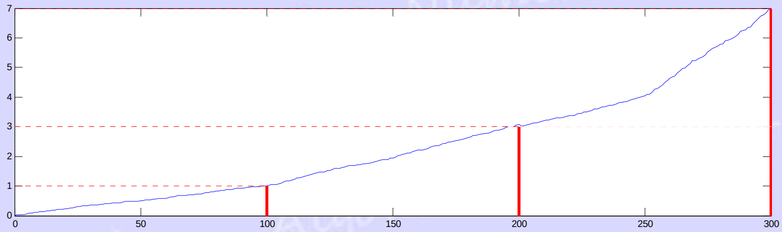
$$\lambda \cdot \left(x_k - \frac{x_k^2}{4} \right) \approx y_k \Rightarrow \left(H \right) \cdot \lambda \approx \left(y_k \right) \Rightarrow \begin{pmatrix} 3/4 \\ 1 \\ 3/4 \end{pmatrix} \cdot \lambda \approx \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$H^T \cdot H = \frac{17}{8} \qquad H^T \cdot v = \begin{pmatrix} 3/4 & 1 & 3/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = 3.5$$

$$\lambda = \frac{3.5}{2.125} = 1.6471 \rightarrow p(x) = 1.6471 \cdot \left(x - \frac{x^2}{4} \right)$$

Problema 6 (ajuste con condiciones previas)

Una ladera tiene un desnivel referido al fondo del valle (x=0) de 1, 3 y 7 mt. en puntos distantes 100, 200 y 300 m de éste (ver figura adjunta).



Se desea modelar dicha ladera con un polinomio h(x) de 2º grado que se ajuste lo mejor posible (mínimos cuadrados) a los datos con la condición adicional de que arranque desde el fondo del valle, esto es, h(0)=0.

<u>Identificación datos del problema:</u>

- Función de ajuste h(x) = polinomio 2º grado, $h(x) = a + bx + cx^2$
- Condición previas h(0)=0
- Tabla de datos a ajustar:

x_k	100	200	300
h_k	1	3	7

o

x_k	1	2	3
h_k	1	3	7

(100 mt)

Problema 6 (resolución)

Condición previa: $h(0) = a = 0$. La función de ajuste queda $h(x) = bx + cx^2$

Usando los datos de la tabla, el sistema sobredeterminado a resolver queda:

$$H\bar{c} = \bar{v} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \\ 3 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 7 \end{pmatrix}$$

<u>Ecuaciones normales:</u>

$$H^T H = \begin{pmatrix} 14 & 36 \\ 36 & 98 \end{pmatrix} \qquad H^T \bar{v} = \begin{pmatrix} 28 \\ 76 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \begin{pmatrix} 14 & 36 \\ 36 & 98 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 28 \\ 76 \end{pmatrix}$$

$$b = 0.1053, c = 0.7368 \quad \Rightarrow h(x) = 0.1053x + 0.7368x^2$$

Recordad que en esta fórmula x debe darse en unidades de 100 metros

Residuos: evaluar h(x) en {1,2,3} y comparar con 1,3,7 = 0.16, -0.16, 0.05 m

Alternativamente: calcular res = v – H*<u>c</u>

Prob 10 (Ex 2016): cond previas + linearizar

Se quiere resolver el problema de ajustar la tabla:

tk	-1	0	1	2
yk	-2	-1	0	3

con funciones $y(t)=\dfrac{A+Bt}{1+Ct^2}$ que verifiquen la condición previa y′(0)=1.

Imponer la condición previa, linealizar el problema y escribir en forma matricial el sistema sobredeterminado resultante. Indicad las ecuaciones normales a resolver.

Nota: $y'(t)=\dfrac{B\cdot\left(1+Ct^2\right)-2C\cdot t\cdot(A+Bt)}{\left(1+Ct^2\right)^2}$

Con la condición previa: $y'(0)=\dfrac{B(1)-0}{(1)}=B=1$ gastamos un coeficiente.

Las funciones de nuestro ajuste quedan: $y(t)=\dfrac{A+t}{1+Ct^2} \longrightarrow y_k \approx \dfrac{A+t_k}{1+Ct_k^2}$

Pasando el denominador al otro lado: $y_k+Cy_kt_k^2 \approx A+t_k$

Separando términos con incógnitas: $y_k-t_k \approx A+C\left(-y_kt_k^2\right)$

Examen 2016: condiciones previas + linearizar

$$A\cdot 1+C\left(-y_kt_k^2\right)\approx y_k-t_k$$

tk	-1	0	1	2
yk	-2	-1	0	3

$$\begin{pmatrix}1 & 2\\ 1 & 0\\ 1 & 0\\ 1 & -12\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\\ C\end{pmatrix}\approx\begin{pmatrix}-1\\ -1\\ -1\\ 1\end{pmatrix}$$

Ecuaciones normales: $\begin{pmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ 2 & 0 & 0 & -12\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2\\ 1 & 0\\ 1 & 0\\ 1 & -12\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\\ C\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ 2 & 0 & 0 & -12\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1\\ -1\\ -1\\ 1\end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix}4 & -10\\ -10 & 148\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\\ C\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-2\\ -14\end{pmatrix}$$

¿Qué nos queda por ver en ajuste?

El caso básico lo tenemos cubierto (y desde el punto de vista de su resolución en MATLAB es prácticamente idéntico a lo que hicimos en la interpolación).

Estudiaremos algunas variantes del problema de ajuste básico:

A) El ajuste no se plantea con funciones del tipo $u(t) = \sum_{k=1}^{n} c_k b_k(t)$

¿Cómo resolver un mejor ajuste con una función del tipo $u(t) = Ae^{\beta t}$?

B) El problema puede tener una mezcla de condiciones estrictas (hay que cumplirlas de forma exacta) y otras aproximadas. Mezclamos aspectos de interpolación (estamos obligados a pasar por unos ciertos puntos) y de ajuste (nos basta con pasar cerca de los otros).

C) Sin llegar al caso anterior de tener algunas condiciones exactas, es posible que ciertos datos sean más importantes que otros (p.e. han sido tomados por un observador más experimentado).

¿Cómo reflejar esa diferencia de calidades en el ajuste?

AJUSTE con PESOS

C) Uso de Pesos (LAB)

Algunos de los datos pueden ser mejores que otros y habrá que ajustarlos mejor.

¿Cómo se lo indicamos al algoritmo? Cambiando definición del error a minimizar:

$$E = \sum_k (y_k - u(t_k))^2 = \sum_k e_k^2 \longrightarrow E_\omega = \sum_k \omega_k (y_k - u(t_k))^2 = \sum_k \omega_k \cdot e_k^2$$

- Cada peso ωk (siempre positivo) indica la calidad del dato {tk, yk}
- Valores altos de ωk hacen que el residuo del k-ésimo dato tenga una mayor importancia en el error global.
- Un algoritmo que intente minimizar el error global Eω se esforzará en reducir más los errores de aquellos datos con un peso grande.
- Lo importante es la relación entre los pesos, no su valor absoluto (si todos los pesos son iguales volvemos al problema sin pesos)

Solución del problema con pesos

La solución viene dada por una sencilla modificación de las ecuaciones normales:

La solución que minimiza $\mathrm{E} = \sum_{\mathrm{k}} \mathrm{e}_{\mathrm{k}}^2$ corresponde a $\left(\mathrm{H}^{\mathrm{T}}\mathrm{H}\right)\cdot \overline{\mathrm{c}} = \mathrm{H}^{\mathrm{T}} \cdot \overline{\mathrm{v}}$

La solución que minimiza $E = \sum_{k} \omega_k \cdot e_k^2$ es : $\left(\mathrm{H}^{\mathrm{T}}\mathrm{WH}\right)\cdot \overline{\mathrm{c}} = \mathrm{H}^{\mathrm{T}}\mathrm{W} \cdot \overline{\mathrm{v}}$

siendo W una matriz diagonal, cuya diagonal son los pesos $\{\omega_k\}$ del problema:

$$W = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_N \end{pmatrix}$$

En MATLAB si w es un vector de tamaño n:

W = diag(w)

es una matriz diagonal n x n cuya diagonal son los elementos del vector w.

Resolución sin construir ecuaciones normales

El caso H·c ~ v se resolvía en MATLAB con c = H\v sin construir H^T·H, …

¿Cómo resolver el caso con pesos sin construir H^T·W·H y H^T·W·v?

Construir la matriz H_2 = sqrt(W)·H y v_2 = sqrt(W)·v y hacer c = H_2\v_2.

Equivale a multiplicar las ecuaciones por diferentes constantes.

DEMO: c = H_2\$v_2$ es la solución del sistema: $H_2^T \cdot H_2 \cdot \overline{c} = H_2^T \cdot \overline{v}_2$

Substituyendo H_2 y v_2 por los valores indicados antes y usando el hecho de que W es diagonal:

$$\left(\sqrt{W}H\right)^T\left(\sqrt{W}H\right)\cdot \overline{c} = \left(\sqrt{W}H\right)^T\left(\sqrt{W}\,\overline{v}\right)$$

$$H^T \cdot W \cdot H \cdot \overline{c} = H^T \cdot W \cdot \overline{v}$$

que son las ecuaciones normales del problema con pesos.

Ejemplo

Ajuste con una parábola a una tabla de 5 puntos:

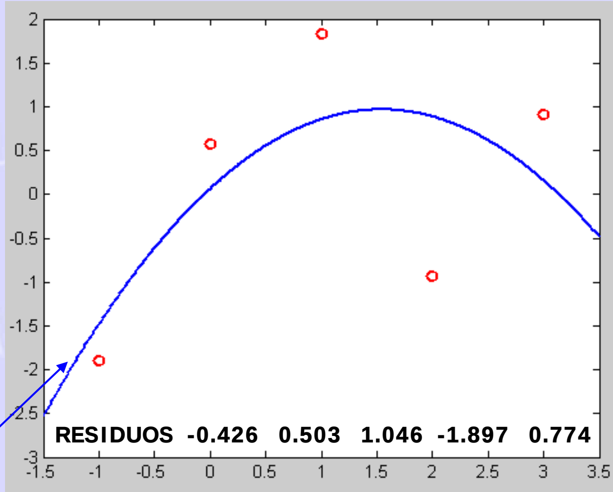
tk	-1	0	1	2	3
yk	-2.1	0.6	1.8	-0.9	0.9

Resolución sin pesos: $p(t) = a + bt + ct^2$

$$\begin{pmatrix}1 & -1 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & 2 & 4\\ 1 & 3 & 9\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\\ c\end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix}-2.1\\ +0.6\\ +1.8\\ -0.9\\ +0.9\end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{cccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ 1 & t_k & t_k^2 & y_k \end{array}$$

$$p(t) = 0.02 + 1.26\cdot t - 0.41\cdot t^2$$



PROBLEMA: puntos 1, 2, 3 y 5 son buenas “medidas” pero 4º punto tenía un gran error.

Solución con pesos

Si conozco el problema (¿cómo?) podría p.e. usar pesos:

1	1	1	0.01	1

Doy muy poca importancia a la veracidad del 4º dato

Misma matriz H y vector v, pero usando una matriz W de pesos y resolviendo:

$$\left(H^T W H\right)\cdot \overline{c} = H^T W \cdot \overline{v}$$

$$W = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0.01 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$p(t) = 0.50 + 1.96\cdot t - 0.61\cdot t^2$$