Universidad de Buenos Aires - Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Depto. de Matemática

Optimización

Primer Cuatrimestre 2016

Trabajo Práctico N° 1: Ajuste de círculos.

El objetivo de este trabajo es implementar y comparar algoritmos que ajusten conjuntos de datos con círculos, siguiendo diferentes metodologías. A lo largo de todo el texto, asumiremos que los datos vienen dados por vectores $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)^t$ e $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_n)^t$, de manera tal que los puntos (x_i, y_i) caigan aproximadamente en un círculo.

Ajuste algebraico

Un círculo puede definirse implíctamente con la ecuación:

$$x^2 + y^2 - 2ax - 2by - c = 0.$$

Si todos los datos cayeran sobre un círculo tendríamos que la ecuación se satisface para todo (x_i, y_i). Asumiendo que esto no sucede (los datos contienen error), buscaremos valores de a, b y c que minimicen:

$$\sum_i (x_i^2 + y_i^2 - 2ax_i - 2by_i - c)^2.$$

O, equivalentemente:

$$\min_{a,b,c} \left\|2a\mathbf{x} + 2b\mathbf{y} + \mathbb{1}c - \mathbf{p}\right\|, \qquad \text{donde } \mathbf{p} = \left(x_1^2 + y_1^2, \ldots, x_n^2 + y_n^2\right)^t. \tag{1}$$

Este enfoque se conoce como *ajuste algebraico* del círculo, dado que se propone ajustar los parámetros de la ecuación algebraica que lo define.

Ejercicio 1 Observar que (1) es un problema de cuadrados mínimos y escribir la matriz del ajuste. Implementar un algoritmo que reciba como datos dos vectores $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ y resuelva (1). Usar el comando `qr` de Matlab.

Ajuste geométrico

El ajuste algebraico, al ceñirse a un modelo de cuadrados mínimos clásico, puede resolverse de manera simple y veloz. Sin embargo, no tiene en cuenta la naturaleza geométrica del problema: no minimiza ninguna distancia. Esto hace que en algunos casos se obtengan resultados muy distintos de los esperados. El *ajuste geométrico* consiste en minimizar las distancias de los datos al círculo.

Notamos $C(a, b, r)$ al círculo con centro (a, b) y radio r y

$$d_i = \left|\sqrt{(x_i - a)^2 + (y_i - b)^2} - r\right|,$$

la distancia de (x_i, y_i) a $C(a, b, r)$. El problema de determinar los parámetros a, b, r que mejor ajusten los datos $\mathbf{x}$,$\mathbf{y}$ está dado por:

$$\min F(a, b, r) \tag{2}$$

donde

$$F(a, b, r) = \sum_{i=1}^{n} d_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\sqrt{(x_i - a)^2 + (y_i - b)^2} - r \right)^2.$$

Es importante observar que este es un problema de cuadrados mínimos *no lineal*, por lo cual no es posible aplicar de manera directa las técnicas habituales de cuadrados mínimos.

En una primera aproximación podríamos modificar el funcional de manera que resulte posible aplicar las técnicas usuales de cuadrados mínimos (lineales). Esto puede lograrse, por ejemplo, considerando:

$$\widetilde{F}(a, b, r) = \sum_{i=1}^{n} \tilde{d}_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left((x_i - a)^2 + (y_i - b)^2 - r^2 \right)^2 \tag{3}$$

Este enfoque, sin embargo, no aporta ningún avance significativo:

Ejercicio 2 Probar que minimizar $\widetilde{F}$ es equivalente a resolver el ajuste algebraico (1).

Para resolver (2) utilizaremos el método iterativo de Gauss-Newton, que describimos a continuación. El objetivo es minimizar

$$\sum_{i=1}^{n} d_i(\theta)^2, \quad \theta = (a, b, r).$$

Notamos $\mathbf{d}(\theta) = (d_1(\theta), \ldots, d_n(\theta))^t$. Idealmente (si los datos coincidieran en un mismo círculo) tendríamos que la solución optima θ^* satisface $\mathbf{d}(\theta^*) = \mathbf{0}$.

Desarrollando el polinomio de Taylor a orden 1 tenemos que:

$$\mathbf{d}(\theta + \mathbf{h}) \simeq \mathbf{d}(\theta) + J(\theta)\mathbf{h} \sim \mathbf{0},$$

donde J es la matriz diferencial de $\mathbf{d}$. El método de Gauss-Newton toma una solución inicial θ_0, resuelve el problema de cuadrados mínimos:

$$J(\theta_0)\mathbf{h} = -\mathbf{d}(\theta_0), \tag{4}$$

toma $\theta_1 = \theta_0 + \mathbf{h}$, e itera el procedimiento, calculando una sucesión θ_i y deteniéndose cuando se satisface algún criterio de convergencia.

Ejercicio 3 Estudiar, analíticamente, la iteración que daría el método de Newton-Raphson para el problema (2). Comparar con el método de Gauss-Newton descripto anteriormente. ¿Qué ventajas presenta Gauss-Newton?

Ejercicio 4 Calcular analíticamente $J(\theta)$ para el problema (2) e implementar el algoritmo de Gauss-Newton, resolviendo (4) a través de la descomposición en valores singulares de J, $J = U\Sigma V^t$. (Usar el comando `svd` de Matlab).

Para probar todos los algoritmos implementados, en la página de la materia está disponible el archivo `datos.mat`. Al cargar `datos.dat` en Matlab se generan varias matrices de nombre: `datos_i` ($i = 1, \ldots, 10$). Cada una de estas matrices de $n_i \times 2$ corresponde a un ejemplo y contiene en su primera columna los valores de $\mathbf{x}$ y en la segunda los valores de $\mathbf{y}$.