Departamento de Ciencias de la Computación
Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura
(FCEIA-UNR)

Métodos Numéricos

Prof. Alejandro G. Marchetti

Unidad VII

Ajuste de Curvas

Noviembre de 2020

1. Polinomios de Chebyshev

1.1. Definición

Para $n \geq 0$ definimos la función

$$T_n(x) = \cos\left(n \times \text{acos}(x)\right), \qquad -1 \leq x \leq 1 \tag{1}$$

De esta definición no es obvio que $T_n(x)$ es un polinomio en x de grado n, pero verificaremos este hecho a continuación. Introduciendo

$$\theta = \text{acos}(x) \quad \text{o} \quad x = \cos(\theta), \quad 0 \leq \theta \leq \pi$$

tenemos

$$T_n(x) = \cos(n\theta)$$

Evaluemos $T_n(x)$ para los primeros tres valores de n,

- $\underline{n=0}$ $\quad T_0(x) = \cos(0 \times \theta) = 1$
- $\underline{n=1}$ $\quad T_1(x) = \cos(\theta) = x$
- $\underline{n=2}$ $\quad T_2(x) = \cos(2\theta) = 2\cos^2(\theta) - 1 = 2x^2 - 1$

Hasta aquí vemos que efectivamente obtenemos un polinomio de grado n. Para analizar el caso general consideraremos la siguiente fórmula trigonométrica:

$$\cos(\alpha \pm \beta) = \cos(\alpha)\cos(\beta) \mp \sin(\alpha)\sin(\beta) \tag{2}$$

Aplicando la fórmula (2) obtenemos para $n \geq 1$,

$$\begin{aligned} T_{n+1}(x) &= \cos\left((n+1)\theta\right) = \cos(n\theta + \theta) \\ &= \cos(n\theta)\cos(\theta) - \sin(n\theta)\sin(\theta) \\ T_{n-1}(x) &= \cos\left((n-1)\theta\right)\cos(n\theta - \theta) \\ &= \cos(n\theta)\cos(\theta) + \sin(n\theta)\sin(\theta) \end{aligned}$$

Sumando ambas expresiones obtenemos

$$T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x) = 2\cos(n\theta)\cos(\theta) = 2xT_n(x)$$

Luego

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \qquad n \geq 1 \tag{3}$$

La ecuación (3) nos da la relación de recurrencia para polinomios de Chebyshev. Siendo $T_0(x) = 1$ y $T_1(x) = x$, la relación de recurrencia demuestra que $T_n(x)$, dado por la ecuación (1) es en efecto un polinomio de grado n.

Ejemplo 1

$$\begin{aligned} T_2(x) &= 2xT_1(x) - T_0(x) = 2x^2 - 1 \\ T_3(x) &= 2xT_2(x) - T_1(x) = 2x(2x^2 - 1) - x = 4x^3 - 3x \end{aligned}$$

1.2. Propiedades

Veamos cuales son las principales propiedades de los polinomios de Chebyshev. Para todo $n \geq 0$ se cumple:

$$|T_n(x)| \leq 1, \qquad -1 \leq x \leq 1$$
$$T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \text{términos de grado menor que } n$$

Todas las raíces de los polinomios de Chebyshev se encuentran entre $x = -1$ y $x = 1$, y el valor absoluto de los polinomios de Chebyshev en el intervalo $[-1,\ 1]$ es menor o igual a 1. Como ejemplo, véase la gráfica de $T_4(x)$ en la Figura 1.

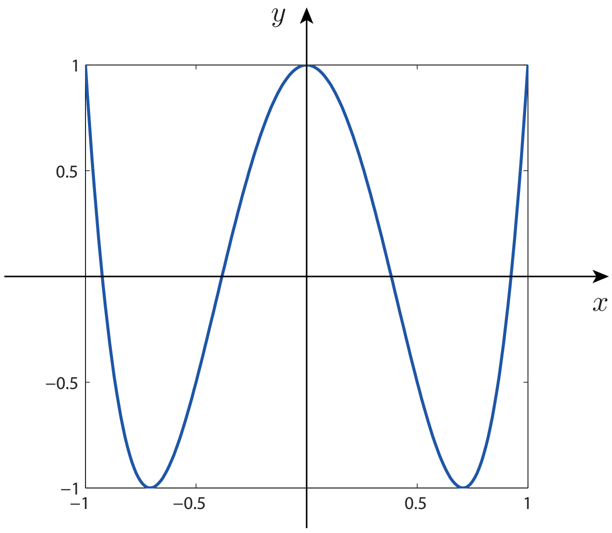

Figura 1: Polinomio de Chebyshev $T_4(x)$.

El polinomio mónico (o normalizado) de Chebyshev está dado por:

$$\tilde{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x) = x^n + \text{términos de grado menor que } n$$

Luego

$$|\tilde{T}_n(x)| \leq \frac{1}{2^{n-1}}, \qquad -1 \leq x \leq 1$$

Teorema 1 *Sea $n \in \mathbb{Z}$, $n \geq 1$. De entre todos los posibles polinomios mónicos de grado n, $\tilde{T}_n(x)$ es el polinomio mónico con menor máximo en $[-1,\ 1]$, y su valor máximo en $[-1,\ 1]$ es $\frac{1}{2^{n-1}}$.*

1.3. Aproximación Mediante Polinomios de Chebyshev

Supongamos que se desea utilizar un polinomio de interpolación para aproximar una función $f(x)$ en un intervalo $[a, b]$. El fenómeno de Runge es un claro indicio de que no es conveniente elegir los nodos de interpolación uniformemente espaciados.

Lo ideal sería elegir los nodos de forma de minimizar el máximo error de interpolación en el intervalo. Definiendo

$$E(p) = \max_{x \in [a,b]} |f(x) - p(x)|$$

queremos hallar la mejor aproximación posible para un grado dado n. Definimos el *error minimax* como:

$$\begin{aligned} \rho_n(f) &= \min_{\text{grado}(p)\le n} E(p) \\ &= \min_{\text{grado}(p)\le n} \left(\max_{x\in[a,b]} |f(x)-p(x)| \right) \end{aligned} \tag{4}$$

Es decir, $\rho_n(f)$ es la menor cota superior sobre el error que se puede obtener al aproximar $f(x)$ por un polinomio de grado $\le n$ en el intervalo $[a,b]$. El polinomio correspondiente, denotado $m_n(x)$, es el *polinomio minimax*. Es decir, $E(m_n) = \rho_n(f)$. Sin embargo, el polinomio minimax es muy difícil de obtener, ya que para ello se necesita resolver el problema de optimización no lineal minimax dado por la ecuación (4). En su lugar, se puede obtener una aproximación del polinomio minimax eligiendo los nodos de interpolación en base a las raíces del polinomio de Chebyshev. Ejemplificaremos el procedimiento para el caso de $n = 3$.

Sea $f(x)$ continua en $[a,b] = [-1,1]$, y sean x_0, x_1, x_2, x_3 los nodos de interpolación en $[-1,1]$. Sea $p_3(x)$ el polinomio de grado ≤ 3 que interpola $f(x)$ en $\{x_0,x_1,x_2,x_3\}$. El error de interpolación está dado por:

$$\begin{aligned} f(x) - p_3(x) &= \frac{\Phi_3(x)}{4!} f^{(4)}(\xi(x)), \qquad -1 \le x \le 1 \\ \Phi_3(x) &= (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3) \end{aligned}$$

Queremos hallar los nodos $\{x_0,x_1,x_2,x_3\}$ que minimizan $\max_{x\in[-1,1]} |f(x)-p_3(x)|$. Vemos que la elección de los nodos afecta de forma directa al polinomio $\Phi_3(x)$ y de forma indirecta y difícil de predecir al término $f^{(4)}(\xi(x))$. Luego, como una aproximación al polinomio minimax, podemos elegir los nodos $\{x_0,x_1,x_2,x_3\}$ que minimizan $\max_{x\in[-1,1]} |\Phi_3(x)|$. Ahora, $\Phi_3(x)$ es un polinomio mónico de grado 4:

$$\Phi_3(x) = x^4 + \text{términos de grado menor a 4}$$

Luego, por el Teorema 1, elegimos

$$\Phi_3(x) = \tilde{T}_4(x) = \frac{T_4(x)}{2^3} = \frac{1}{8}(8x^4 - 8x^2 + 1) \tag{5}$$

Los nodos $\{x_0,x_1,x_2,x_3\}$ para obtener el polinomio de aproximación $p_3(x)$, los elegimos como los ceros del polinomio de Chebyshev $T_4(x)$. Hallar las raíces de $T_4(x)$ implica resolver

$$T_4(x) = \cos(4\theta) = 0, \qquad x = \cos(x) \tag{6}$$

Por supuesto, también podemos obtener las raíces a partir de la expresión del polinomio dado en la ecuación (5), pero es mucho más fácil obtenerlas a partir de (6). La función $\cos(4\theta)$ tiene infinitos ceros dados por

$$4\theta = \pm\frac{\pi}{2}, \quad \pm\frac{3\pi}{2}, \quad \pm\frac{5\pi}{2}, \quad \pm\frac{7\pi}{2}, \ \ldots$$

es decir, para

$$\theta = \pm\frac{\pi}{8}, \quad \pm\frac{3\pi}{8}, \quad \pm\frac{5\pi}{8}, \quad \pm\frac{7\pi}{8}, \ \ldots$$

Luego, usando $\cos(\pi) = \cos(-\pi)$, tenemos

$$x = \underbrace{\cos\left(\frac{\pi}{8}\right)}_{0{,}9239}, \quad \underbrace{\cos\left(\frac{3\pi}{8}\right)}_{0{,}3827}, \quad \underbrace{\cos\left(\frac{5\pi}{8}\right)}_{-0{,}3827}, \quad \underbrace{\cos\left(\frac{7\pi}{8}\right)}_{-0{,}9239}$$

Los primeros 4 valores son distintos, los siguientes son repetitivos. Por ejemplo,

$$\cos\left(\frac{9\pi}{8}\right) = \cos\left(\frac{7\pi}{8}\right)$$

Luego, elegimos

$$x_0 = -0{,}9239, \quad x_1 = -0{,}3827, \quad x_2 = 0{,}3827, \quad x_3 = 0{,}9239$$

como nodos de interpolación para hallar $p_3(x)$.

2. Aproximación de Mínimos Cuadrados

2.1. Problema de Mínimos Cuadrados

Sea $y = g(x)$ una relación desconocida entre las variables x e y. Experimentalmente se obtiene un conjunto de pares ordenados

$$\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_m, y_m)\}$$

donde

$$y_i = g(x_i) + v_i$$

donde v_i es el error de medición.

A partir de los datos, queremos aproximar $g(x)$ mediante una función $f(x)$ de la forma:

$$f(x) = a_1\Phi_1(x) + a_2\Phi_2(x) + \cdots + a_p\Phi_p(x) \tag{7}$$

donde $a_1,\ a_2,\ \ldots,\ a_p$ son coeficientes ajustables y $\Phi_1(x),\ \Phi_2(x),\ \ldots,\ \Phi_p(x)$ son funciones dadas.

Definimos el error $|\varepsilon_i|$ como la distancia vertical entre el punto (x_i, y_i) y su aproximación $(x_i, f(x_i))$.

$$|\varepsilon_i| = |f(x_i) - y_i|, \qquad i = 1, \ldots, m \tag{8}$$

El problema de mínimos cuadrados consiste en hallar los valores de los coeficientes $a_1,\ a_2,\ \ldots,\ a_p$ que minimizan la suma de los errores al cuadrado, es decir, que minimizan la función

$$\begin{aligned} G(a_1, a_2, \ldots, a_p) &= \sum_{j=1}^{m} \varepsilon_i^2 \qquad (9) \\ &= \sum_{j=1}^{m} \left[a_1\Phi_1(x_j) + a_2\Phi_2(x_j) + \cdots + a_p\Phi_p(x_j) - y_j\right]^2 \end{aligned}$$

El problema de optimización se puede escribir como

$$\min_{\mathbf{x}} G(\mathbf{x}) \tag{10}$$

donde $\mathbf{x} = [a_1, a_2, \ldots, a_p]^\mathsf{T}$. Siendo $G(\mathbf{x})$ una función cuadrática con matriz hessiana semidefinida positiva, se sabe que $G(\mathbf{x})$ es una función convexa, y por lo tanto, un mínimo local de $G(\mathbf{x})$ es también un mínimo global. Siendo además G una función diferenciable, se sabe que cualquier punto estacionario de G es un mínimo local. Un punto estacionario es un punto para el cual el gradiente de G se anula, es decir

$$\nabla G(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial G}{\partial a_1}, \frac{\partial G}{\partial a_2}, \ldots, \frac{\partial G}{\partial a_p}\right] = [0, 0, \ldots, 0]$$

Luego, siendo (10) un problema sin restricciones, el mínimo satisface

$$\frac{\partial G}{\partial a_i} = \sum_{j=1}^{m} 2\big[a_1\Phi_1(x_j) + \cdots + a_p\Phi_p(x_j) - y_j\big]\Phi_i(x_j) = 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, p$$

Reordenando, obtenemos el siguiente sistema lineal de p ecuaciones con p incógnitas

$$\left[\sum_{j=1}^{m} \Phi_1(x_j)\Phi_i(x_j)\right] a_1 + \cdots + \left[\sum_{j=1}^{m} \Phi_p(x_j)\Phi_i(x_j)\right] a_p = \sum_{j=1}^{m} y_j\Phi_i(x_j), \qquad i = 1, \ldots, p \quad (11)$$

La solución de mínimos cuadrados se obtiene por solución del sistema (11).

Aproximación Lineal de Mínimos Cuadrados

En la aproximación lineal de mínimos cuadrados se aproximan los datos mediante un polinomio de primer grado:

$$f(x) = a_1 + a_2 x$$

es decir, tomando en la ecuación (7) $\Phi_1(x) = 1$ y $\Phi_2(x) = x$. En este caso, el sistema de ecuaciones (11) se reduce a

$$\begin{aligned} m a_1 + \left[\sum_{j=1}^{m} x_j\right] a_2 &= \sum_{j=1}^{m} y_j \\ \left[\sum_{j=1}^{m} x_j\right] a_1 + \left[\sum_{j=1}^{m} x_j^2\right] a_2 &= \sum_{j=1}^{m} x_j y_j \end{aligned}$$

En la Figura 2 puede apreciarse cómo se aproximan los datos por mínimos cuadrados mediante un polinomio de primer grado.

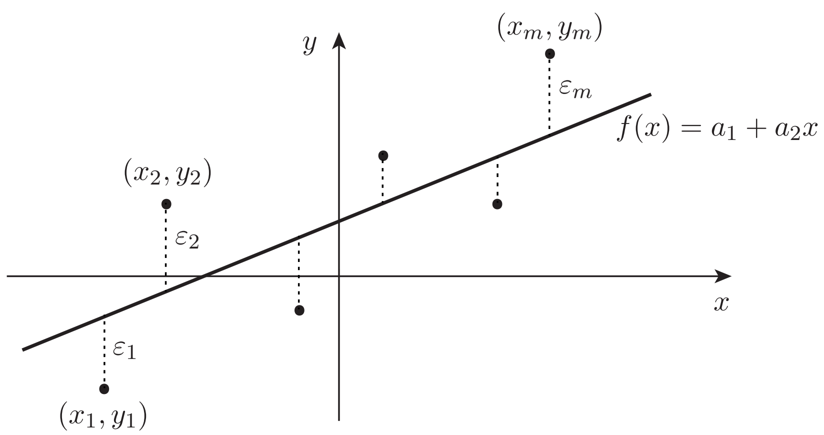

Figura 2: Aproximación lineal de mínimos cuadrados.

2.2. Aproximación de Mínimos Cuadrados en Forma Vectorial

En forma vectorial, el error de aproximación dado por la ecuación (8) se puede escribir como

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathsf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$$

con

$$\mathsf{A} = \begin{bmatrix} \Phi_1(x_1) & \dots & \Phi_p(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \Phi_1(x_m) & \dots & \Phi_p(x_m) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times p}, \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m, \qquad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_p \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^p,$$

Problema de Mínimos Cuadrados. Para $\mathsf{A} \in \mathbb{R}^{m\times p}$ y $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, sea $\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathsf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$. El problema de mínimos cuadrados es el de hallar un vector $\mathbf{x}$ que minimize

$$G(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m} \varepsilon_i^2 = \boldsymbol{\varepsilon}^\mathsf{T}\boldsymbol{\varepsilon} = (\mathsf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^\mathsf{T}(\mathsf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})$$

Previo a resolver el problema de mínimos cuadrados, revisaremos la forma que toma el gradiente de un término lineal y de un término cuadrático, multivariables. Sean $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ y sea $\mathsf{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ una matriz simétrica. Sean las funciones $f(\mathbf{x}) = \mathbf{b}^\mathsf{T}\mathbf{x}$, y $g(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\mathsf{T}\mathsf{Q}\mathbf{x}$. Luego

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}}(\mathbf{b}^\mathsf{T}\mathbf{x}) = \mathbf{b}^\mathsf{T} \tag{12}$$

$$\nabla g(\mathbf{x}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}}(\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathsf{Q}\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathsf{Q} \tag{13}$$

Teorema 2

- *El conjunto solución del problema de mínimos cuadrados es el conjunto de soluciones del sistema*

$$\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A}\mathbf{x} = \mathsf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b} \tag{14}$$

- *Existe una solución de mínimos cuadrados única si y sólo si* $\operatorname{rango}(\mathsf{A}) = n$, *en cuyo caso* $\mathbf{x} = \left(\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A}\right)^{-1}\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b}$.

Demostración.

$$G(\mathbf{x}) = (\mathsf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^\mathsf{T}(\mathsf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) = \mathbf{x}^\mathsf{T}\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A}\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b} + \mathbf{b}^\mathsf{T}\mathbf{b}$$

Evaluando el gradiente de $G(x)$ con ayuda de (12) y (13), obtenemos:

$$\nabla G(\mathbf{x}) = 2\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A} - 2\mathbf{b}^\mathsf{T}\mathsf{A}$$

Por otro lado, la matriz hessiana de $G(x)$ está dada por

$$\nabla^2 G(\mathbf{x}) = 2\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A}$$

Vemos que la matriz hessiana es semidefinida positiva y, por lo tanto, cualquier punto estacionario de $G(\mathbf{x})$ es un mínimo de $G(\mathbf{x})$. Para obtener puntos estacionarios de $G(\mathbf{x})$ igualamos su gradiente a cero, $\nabla G(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, de donde obtenemos el sistema (14) luego de transponer.

Por otra parte, el sistema lineal (14) tiene solución única si y solo si $\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A}$ es invertible, y $\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A}$ es invertible si y solo si A tiene rango n, es decir, si las columnas de A son linealmente independientes. $\square$

2.3. Aproximación Polinomial de Mínimos Cuadrados

- Polinomio de primer grado:

$$
\begin{aligned}
&f(x) = a_1 + a_2 x \\
&\Phi_1(x) = 1, \qquad \Phi_2(x) = x
\end{aligned}
$$

- Polinomio de segundo grado:

$$
\begin{aligned}
&f(x) = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 \\
&\Phi_1(x) = 1, \qquad \Phi_2(x) = x, \qquad \Phi_3(x) = x^2
\end{aligned}
$$

2.4. Casos Especiales

Función exponencial natural. Algunas veces conviene suponer que los datos tienen una relación exponencial de la forma

$$f(x) = a_2 e^{a_1 x}$$

El problema surge al querer reducir al mínimo la función

$$G(a_1, a_2) = \sum_{j=1}^{m} (y_j - a_2 e^{a_1 x_j})^2$$

Igualando a cero el gradiente de G obtenemos

$$
\begin{aligned}
0 = \frac{\partial G}{\partial a_1} &= 2 \sum_{j=1}^{m} (y_j - a_2 e^{a_1 x_j})(-a_2 x_j e^{a_1 x_j}) \\
0 = \frac{\partial G}{\partial a_2} &= 2 \sum_{j=1}^{m} (y_j - a_2 e^{a_1 x_j})(-e^{a_1 x_j})
\end{aligned}
$$

El problema es que no es posible obtener una solución exacta de este sistema no lineal en a_1 y en a_2.

La solución consiste en tomar el logaritmo de la función de aproximación:

$$\ln(f(x)) = \ln(a_2) + a_1 x$$

Podemos entonces definir el error

$$\varepsilon_i = \ln(f(x_i)) - \ln(y_i) = \ln(a_2) + a_1 x_i - \ln(y_i), \qquad i = 1, \ldots, m$$

En forma vectorial tenemos

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathsf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$$

con

$$\mathsf{A} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times 2}, \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \ln(y_1) \\ \ln(y_2) \\ \vdots \\ \ln(y_m) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m, \qquad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \ln(a_2) \\ a_1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2,$$

Función potencial. Otro ejemplo es la función potencial

$$f(x) = a_2 x^{a_1}$$

Tomando el logaritmo tenemos

$$\ln(f(x)) = \ln(a_2) + a_1 \ln(x)$$

En este caso, el error está dado por

$$\varepsilon_i = \ln(f(x_i)) - \ln(y_i) = \ln(a_2) + a_1 \ln(x_i) - \ln(y_i), \qquad i = 1, \ldots, m$$

En forma vectorial tenemos

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathsf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}$$

con

$$\mathsf{A} = \begin{bmatrix} 1 & \ln(x_1) \\ 1 & \ln(x_2) \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \ln(x_m) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times 2}, \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \ln(y_1) \\ \ln(y_2) \\ \vdots \\ \ln(y_m) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m, \qquad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \ln(a_2) \\ a_1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2,$$

2.5. Aplicación de la Factorización QR al Problema de Mínimos Cuadrados

El conjunto solución de mínimos cuadrados es el conjunto solución del sistema

$$\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A}\mathbf{x} = \mathsf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b}$$

Suponga que rango$(\mathsf{A}) = n$, y sea $\mathsf{A} = \mathsf{QR}$. Luego

$$\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A} = (\mathsf{QR})^\mathsf{T}\mathsf{QR} = \mathsf{R}^\mathsf{T}\mathsf{Q}^\mathsf{T}\mathsf{QR} = \mathsf{R}^\mathsf{T}\mathsf{R}$$

Por lo tanto

$$\mathsf{R}^\mathsf{T}\mathsf{R}\mathbf{x} = \mathsf{R}^\mathsf{T}\mathsf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{b} \tag{15}$$

Siendo R no singular (matriz diagonal con elementos diagonales positivos) podemos simplificar (15) como sigue

$$\mathsf{R}\mathbf{x} = \mathsf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{b} \tag{16}$$

El sistema de ecuaciones (16) es un sistema triangular superior que se resuelve por sustitución regresiva.

La solución

$$\mathbf{x} = \mathsf{R}^{-1}\mathsf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{b} = (\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathsf{A})^{-1}\mathsf{A}^\mathsf{T}\mathbf{b}$$

es la solución de $\mathsf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ cuando el sistema es consistente, y es la solución de mínimos cuadrados cuando el sistema es inconsistente.

Bibliografía

1. Kendall E. Atkinson, *An Introduction to Numerical Analysis*, Second edition, John Wiley & Sons, 1989.

2. Carl D. Meyer, *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia PA, United States, 2000.