# Ajuste de funciones. El método de los mínimos cuadrados

## 0. Idea de Interpolación y de ajuste. Soporte y base de ajuste:

Es frecuente encontrar en el análisis numérico funciones $y=f(x)$ definidas por tablas, de forma que solo se conocen los valores que toman en un conjunto finito de puntos, $x_0, x_1, \dots, x_{n-1}, x_n$:

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $x_0$ | $x_1$ | $x_2$ | ... | $x_{n-1}$ | $x_n$ |
| $y_0$ | $y_1$ | $y_2$ | ... | $y_{n-1}$ | $y_n$ |

Con la necesidad de conocer valores de tal función $f(x)$ en puntos distintos de los que ya figuran en la tabla.

El problema de la interpolación consiste en la determinación de una función $g(x)$ que en los puntos de la tabla dada, $x_0, x_1, \dots, x_{n-1}, x_n$, toma los mismos valores, $y_0, y_1, \dots, y_{n-1}, y_n$, de la función f(x) tabulada, mientras que en los puntos intermedios se toman como valores de $f(x)$ los valores que tome la función interpoladora $g(x)$.

Son muchos los fenómenos experimentales que se comportan en ciertos intervalos como funciones de determinadas variables. Realizando su medición en un número finito de puntos se obtendrá una tabla y, al interpolar, una función que describe con un cierto error el fenómeno tabulado.

Teniendo en cuenta el espacio de las funciones de una variable real y en él, el conjunto de $n+1$ funciones $g_0(x), g_1(x), \dots, g_{n-1}(x), g_n(x)$, de forma que cualquier subconjunto de las mismas es linealmente independiente, se trata de encontrar un polinomio generalizado

$$p_n(x)=c_0.g_0(x)+c_1.g_1(x)+\dots+c_{n-1}.g_{n-1}(x)+c_n.g_n(x)$$

tal que

$$p_n(x_i)=y_i,\ i=0,1,\dots,n-1,n$$

Los puntos $x_0, x_1, \dots, x_{n-1}, x_n$, se denominan soporte de la interpolación, y el error cometido depende tanto de la base de la interpolación, las funciones $g_0(x), g_1(x), \dots, g_{n-1}(x), g_n(x)$, como del criterio escogido para la determinación de los coeficientes $c_0, c_1, \dots, c_{n-1}, c_n$, del polinomio generalizado $p_n(x)$.

Sin embargo, cuando se conoce una base de $m+1$ funciones

$$g_0(x), g_1(x), \dots, g_{m-1}(x), g_m(x)$$

con m<n, es decir, en número menor que el número de puntos del soporte, el problema de determinar las $p(x_i)=y_i,\ i=0,1,\dots,n-1,\ n$, no tiene solución, siendo preciso idear otros métodos y otros criterios de aproximación. El problema ahora es el conocido como *problema del ajuste de funciones*.

## 1. Ajuste mediante combinación lineal de las funciones de la base:

Si son $e_i = y_i - p(x_i)$, $i=0,1,...,n-1, n$, las componentes del vector de error,

$$e=(e_0, e_1, ..., e_{n-1}, e_n),$$

se trata de encontrar el polinomio generalizado

$$p(x)=c_0.g_0(x)+c_1.g_1(x)+...+c_m.g_m(x)$$

que haga mínimo el vector de error, esto es, que haga mínima la norma del vector de error.

Cuando tomamos como norma del vector de error la norma euclidiana

$$|e| = +\sqrt{e_0^2 + e_1^2 + e_2^2 + ... + e_n^2}$$

el proceso desemboca en el método conocido como de los *mínimos cuadrados.*

Estudiamos a continuación el ajuste de funciones, primero elementalmente, cuando las funciones del ajuste son potencias de la variable independiente *x*, y, después, cuando tales funciones son polinomios ortogonales y en general funciones ortogonales, tratando de describir el caso de las funciones trigonométricas y asimismo el de los polinomios de Tchebycheff.

## 2. El método de los mínimos cuadrados. Minimizar la norma euclidiana:

Si utilizamos la norma euclidiana, la norma mínima es equivalente a que sea mínima la suma de los cuadrados de las componente del vector, o sea, de los cuadrados de los errores cometidos en el ajuste, por lo que en este caso se acostumbra a denominar *método de los mínimos cuadrados*

$$e = (e_0, e_1, e_2, ..., e_n) \rightarrow |e| = \sqrt{\sum_{k=0}^{m} e_k^2} \rightarrow |e|^2 = \sum_{k=0}^{n} e_k^2$$

donde es, para $k = 0,1,...,n$ :

$$e_k = y_k - p(x_k) = y_k - \sum_{j=0}^{m} c_j g_j(x_k)$$

por tanto

$$|e|^2 = \sum_{k=0}^{n} e_k^2 = \sum_{k=0}^{n} \left( y_k - \sum_{j=0}^{m} c_j g_j(x_k) \right)^2$$

Se trata, en definitiva, de encontrar los valores de los coeficientes, $c_0, c_1, ..., c_m$, a partir de la condición de mínimo para la función de la norma al cuadrado anterior. Esto es, de forma que sea nula la primera derivada.

$$\frac{\partial |e|^2}{\partial c_i} = 0, \quad i = 0,1,...,m$$

En definitiva, para realizar el ajuste lineal de una nube de puntos del plano o soporte, $(x_0,y_0),(x_1,y_1),...,(x_n,y_n)$, se necesita obviamente la base con la que se desea realizar el ajuste: $B=\{g_0(x),g_1(x),...,g_m(x)\}$

Se tiene, entonces, que

$$\frac{\partial|e|^2}{\partial c_i}=\sum_{k=0}^{n}\frac{\partial e_k^2}{\partial c_i}=\sum_{k=0}^{n}2e_k\frac{\partial e_k}{\partial c_i}=\sum_{k=0}^{n}2(y_k-\sum_{j=0}^{m}c_jg_j(x_k))\frac{\partial}{\partial c_i}(y_k-\sum_{j=0}^{m}c_jg_j(x_k))=$$

$$=\sum_{k=0}^{n}2(y_k-\sum_{j=0}^{m}c_jg_j(x_k))(-g_i(x_k))=0,\quad i=0,1,...,m$$

o sea:

$$\sum_{k=0}^{n}\left(\sum_{j=0}^{m}c_jg_j(x_k)-y_k\right)g_i(x_k)=0,\quad i=0,1,2,...,m$$

$$\sum_{k=0}^{n}\left(\sum_{j=0}^{m}c_jg_j(x_k)g_i(x_k)-y_kg_i(x_k)\right)=0,\quad i=0,1,2,...,m$$

$$\sum_{k=0}^{n}\left(c_0g_0(x_k)g_i(x_k)+c_1g_1(x_k)g_i(x_k)+...+c_mg_m(x_k)g_i(x_k)-y_kg_i(x_k)\right)=0,\quad i=0,1,2,...,m$$

$$\sum_{k=0}^{n}c_0g_0(x_k)g_i(x_k)+\sum_{k=0}^{n}c_1g_1(x_k)g_i(x_k)+....+\sum_{k=0}^{n}c_mg_m(x_k)g_i(x_k)-\sum_{k=0}^{n}y_kg_i(x_k))=0,\quad i=0,1,2,...,m$$

2.

Es decir:

$$\sum_{k=0}^{n}c_0g_0(x_k)g_i(x_k)+\sum_{k=0}^{n}c_1g_1(x_k)g_i(x_k)+....+\sum_{k=0}^{n}c_mg_m(x_k)g_i(x_k)=\sum_{k=0}^{n}y_kg_i(x_k),\quad i=0,1,2,...,m$$

3.

Esto es:

$$\sum_{k=0}^{n}c_0g_0(x_k)g_0(x_k)+\sum_{k=0}^{n}c_1g_1(x_k)g_0(x_k)+....+\sum_{k=0}^{n}c_mg_m(x_k)g_0(x_k)=\sum_{k=0}^{n}y_kg_0(x_k)$$

$$\sum_{k=0}^{n}c_0g_0(x_k)g_1(x_k)+\sum_{k=0}^{n}c_1g_1(x_k)g_1(x_k)+....+\sum_{k=0}^{n}c_mg_m(x_k)g_1(x_k)=\sum_{k=0}^{n}y_kg_1(x_k)$$

$$\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad..\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad..\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad..\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots$$

$$\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad..\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad..\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots\quad..\quad\ldots\quad\ldots\quad\ldots$$

$$\sum_{k=0}^{n}c_0g_0(x_k)g_m(x_k)+\sum_{k=0}^{n}c_1g_1(x_k)g_m(x_k)+....+\sum_{k=0}^{n}c_mg_m(x_k)g_m(x_k)=\sum_{k=0}^{n}y_kg_m(x_k)$$

que, en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{n} g_0(x_k)g_0(x_k) & \dots & \sum_{k=0}^{n} g_m(x_k)g_0(x_k) \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \sum_{k=0}^{n} g_0(x_k)g_m(x_k) & \dots & \sum_{k=0}^{n} g_m(x_k)g_m(x_k) \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} c_0 \\ \dots \\ \dots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{n} y_k g_0(x_k) \\ \dots \\ \dots \\ \sum_{k=0}^{n} y_k g_m(x_k) \end{bmatrix}$$

De donde, finalmente, obtenemos los coeficientes del desarrollo lineal de la función de ajuste:

$$\begin{bmatrix} c_0 \\ \dots \\ \dots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{n} g_0(x_k)g_0(x_k) & \dots & \sum_{k=0}^{n} g_m(x_k)g_0(x_k) \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \sum_{k=0}^{n} g_0(x_k)g_m(x_k) & \dots & \sum_{k=0}^{n} g_m(x_k)g_m(x_k) \end{bmatrix}^{-1} . \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{n} y_k g_0(x_k) \\ \dots \\ \dots \\ \sum_{k=0}^{n} y_k g_m(x_k) \end{bmatrix} \quad [2.1]$$

$$p(x) = \sum_{j=0}^{m} c_j g_j(x)$$

**3. Usando como base del ajuste potencias de la variable independiente:**

Supongamos que se tiene para el conjunto del soporte $\{(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$ y para el conjunto base del ajuste las potencias $\{1, x, x^2, \dots, x^m\}$. O sea:

Soporte: $\{(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$

Base: $\{1, x, x^2, \dots, x^m\}$

Se tiene entonces la función de ajuste $p(x) = \sum_{j=0}^{m} c_j x^j$ , y la ecuación matricial [2.1] quedaría así:

$$\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \ldots \\ \ldots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{n} x_k^{0+0} & \sum_{k=0}^{n} x_k^{1+0} & \ldots & \sum_{k=0}^{n} x_k^{m+0} \\ \sum_{k=0}^{n} x_k^{0+1} & \sum_{k=0}^{n} x_k^{1+1} & \ldots & \sum_{k=0}^{n} x_k^{m+1} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \sum_{k=0}^{n} x_k^{0+m} & \sum_{k=0}^{n} x_k^{1+m} & \ldots & \sum_{k=0}^{n} x_k^{m+m} \end{bmatrix}^{-1} . \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{n} y_k x_k^0 \\ \sum_{k=0}^{n} y_k x_k^1 \\ \ldots \\ \ldots \\ \sum_{k=0}^{n} y_k x_k^m \end{bmatrix}$$

que podemos escribir en la forma: $C = S^{-1}U$, donde es S una matriz simétrica de orden m+1, que corresponde al producto de las dos matrices traspuestas:

1. $$S = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ x_0 & x_1 & \ldots & x_n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ x_0^m & x_1^m & \ldots & x_n^m \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} 1 & x_0 & \ldots & x_0^m \\ 1 & x_1 & \ldots & x_1^m \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^m \end{bmatrix}$$

la primera es de orden *(m+1)x(n+1)* y la segunda es de orden *(n+1)x(m+1).* Puesto que el número de columnas de la primera es igual al número de filas de la segunda, ambas son efectivamente multiplicables. Resultando, pues, la matriz cuadrada indicada antes, de orden *m+1*.

Si llamamos

$$M = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & \ldots & x_0^m \\ 1 & x_1 & \ldots & x_1^m \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_n & \ldots & x_n^m \end{bmatrix}$$

será $S = M^t.M$

Con lo cual, la ecuación matricial que permite obtener los coeficientes de la función de ajuste queda así:

$$C = \left(M^t.M\right)^{-1} U$$

Veamos a continuación como actuaríamos en un caso numérico elemental, en el que para un mismo soporte de 4 puntos empleamos una base de ajuste de solo dos potencias de x, $x^0$ y $x^1$ (ajuste lineal) en un primer ejemplo, y una base de ajuste de tres potencias de x, $x^0$, $x^1$ y $x^2$ (ajuste cuadrático) en otro ejemplo.

## 4. Ejemplos numéricos:

Ejemplo 1:

Soporte: $\{(x_0,y_0),(x_1,y_1),(x_2,y_2),(x_3,y_3)\}=\{(-1,-1),(1,1),(3,2),(4,1)\}$

Base del ajuste: $\{g_0(x),g_1(x)\}=\{1,x\}$

Matriz columna U:

$$u_0=\sum_{k=0}^{3}x_k^0y_k=x_0^0y_0+x_1^0y_1+x_2^0y_2+x_3^0y_3=(-1)+1+2+1=3$$

$$u_1=\sum_{k=0}^{3}x_k^1y_k=x_0^1y_0+x_1^1y_1+x_2^1y_2+x_3^1y_3=1+1+3.2+4.1=12$$

Matriz de *M* paso:

$$M=\begin{bmatrix}1 & x_0\\ 1 & x_1\\ 1 & x_2\\ 1 & x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\\ 1 & 3\\ 1 & 4\end{bmatrix},\ M^t=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ -1 & 1 & 3 & 4\end{bmatrix}$$, por tanto el producto:

$$M^t.M=\begin{bmatrix}4 & 7\\ 7 & 27\end{bmatrix}$$

Cálculo de la matriz inversa del producto:

- Determinante: $\left|M^tM\right|=\begin{vmatrix}4 & 7\\ 7 & 27\end{vmatrix}=59$
- Matriz adjunta de la traspuesta: $\left[(M^t.M)^t\right]^+=\begin{bmatrix}27 & -7\\ -7 & 4\end{bmatrix}$
- Matriz inversa:

$$(M^t.M)^{-1}=\frac{1}{\left|M^tM\right|}\left[(M^t.M)^t\right]^+=\frac{1}{59}\begin{bmatrix}27 & -7\\ -7 & 4\end{bmatrix}$$

Calculo de los coeficientes de la función de ajuste:

$$C=(M^t.M)^{-1}.U\rightarrow$$

$$\rightarrow\begin{bmatrix}c_0\\ c_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}27/59 & -7/59\\ -7/59 & 4/59\end{bmatrix}.\begin{bmatrix}3\\ 12\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-3/59\\ 27/59\end{bmatrix}$$

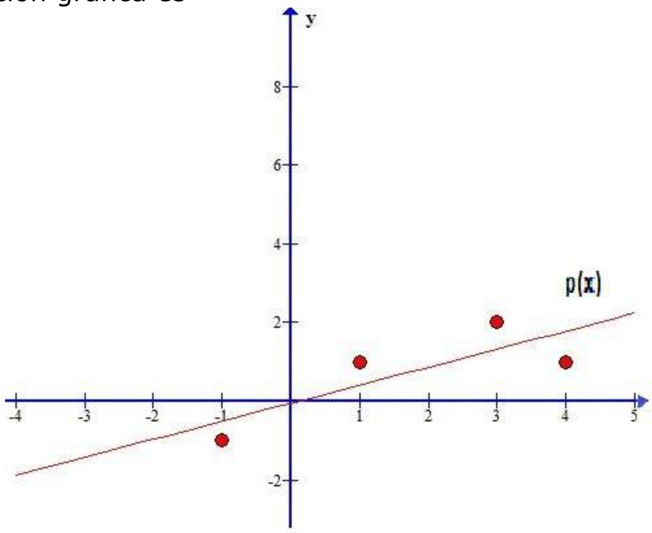
Función de ajuste:

$$p(x)=\sum_{j=0}^{1}c_jx^j=c_0.1+c_1.x=-3/59+27/59\,.x$$

Aproximando:

$$p(x)\approx-0.0508+0.4576.x$$

cuya representación gráfica es




Ejemplo 2:

Soporte: $\{(x_0,y_0),(x_1,y_1),(x_2,y_2),(x_3,y_3)\}=\{(-1,-1),(1,1),(3,2),(4,1)\}$

Base del ajuste: $\{g_0(x),g_1(x),g_2(x)\}=\{1,x,x^2\}$

Matriz columna U:

$$u_0=\sum_{k=0}^{3}x_k^0y_k=x_0^0y_0+x_1^0y_1+x_2^0y_2+x_3^0y_3=(-1)+1+2+1=3$$

$$u_1=\sum_{k=0}^{3}x_k^1y_k=x_0^1y_0+x_1^1y_1+x_2^1y_2+x_3^1y_3=1+1+3.2+4.1=12$$

$$u_2=\sum_{k=0}^{3}x_k^2=x_0^2y_0+x_1^2y_1+x_2^2y_2+x_3^2y_3=-1+1+18+16=34$$

Matriz de *M* paso:

$$M=\begin{bmatrix}1 & x_0 & x_0^2\\ 1 & x_1 & x_1^2\\ 1 & x_2 & x_2^2\\ 1 & x_3 & x_3^2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & -1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & 3 & 9\\ 1 & 4 & 16\end{bmatrix},\quad M^t=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\ -1 & 1 & 3 & 4\\ 1 & 1 & 9 & 16\end{bmatrix}$$ , por tanto el producto:

$$M^t.M=\begin{bmatrix}4 & 7 & 27\\ 7 & 27 & 91\\ 27 & 91 & 339\end{bmatrix}$$

Cálculo de la matriz inversa del producto:

- Determinante: $|M^tM|=\begin{vmatrix}4 & 7 & 27\\ 7 & 27 & 91\\ 27 & 91 & 339\end{vmatrix}=1592$

- Matriz adjunta de la traspuesta: $\left[(M^t.M)^t\right]^+ = \begin{bmatrix} 872 & 84 & -92 \\ 84 & 627 & -175 \\ -92 & -175 & 59 \end{bmatrix}$

- Matriz inversa:

$$(M^t.M)^{-1} = \frac{1}{\left|M^t M\right|}\left[(M^t.M)^t\right]^+ = \begin{bmatrix} 872/1592 & 84/1592 & -92/1592 \\ 84/1592 & 627/1592 & -175/1592 \\ -92/1592 & -175/1592 & 59/1592 \end{bmatrix}$$

Calculo de los coeficientes de la función de ajuste:

$$C = (M^t.M)^{-1}.U \rightarrow$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 872/1592 & 84/1592 & -92/1592 \\ 84/1592 & 627/1592 & -175/1592 \\ -92/1592 & -175/1592 & 59/1592 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} 3 \\ 12 \\ 34 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 496/1592 \\ 1826/1592 \\ -370/1592 \end{bmatrix}$$

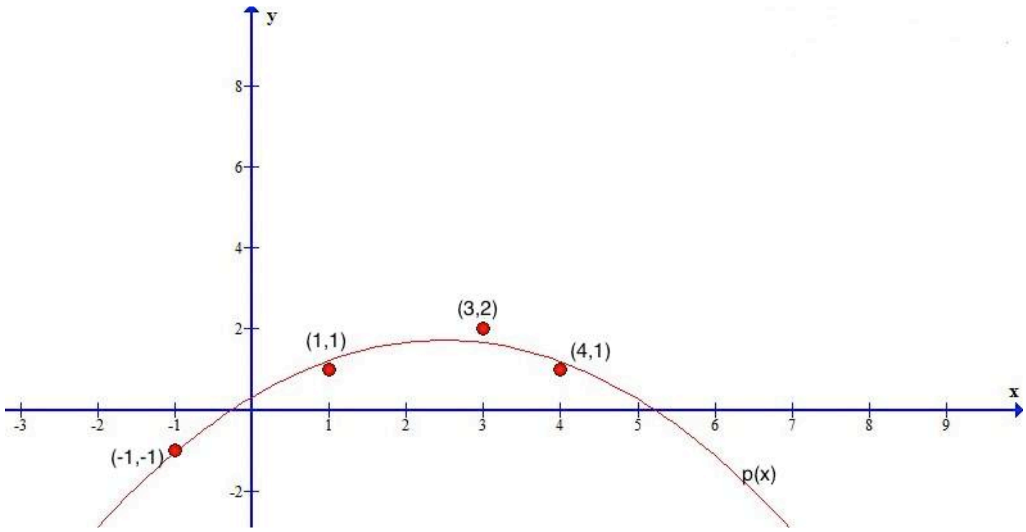
Función de ajuste:

$$p(x) = \sum_{j=0}^{2} c_j x^j = c_0.1 + c_1.x + c_2.x^2 = 496/1592 + 1826/1592.x - 370/1592.x^2$$

Aproximando:

$$p(x) \approx 0.31 + 1.14.x - 0.23.x^2$$

cuya representación gráfica es




## 5. Bibliografía:

Apóstol, T.M., Calculus, Editorial Reverté, Barcelona, 1970
Rey Pator, Y., Calleja, P., Trejo, C.,Análisis Matemático, Editorial Kapeluz, Buenos Aires, 1957
Henrici, P., Elements of Numerical Análisis, John Wiley, N. York, 1964
Scheid, F., Análisis numérico, Mc Graw-Hill, Madrid, 1972