Ajuste de funciones
Ajuste con polinomios de Tchebychef

1. 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, $x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n$:

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, $x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n$, toma los mismos valores, $y_0, y_1, \ldots, y_{n-1}, y_n$, 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 $g_0(x), g_1(x), \ldots, g_{n-1}(x), g_n(x)$, de forma que cualquier subconjunto de las mismas es linealmente independiente, se trata de encontrar un polinomio generalizado

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

tal que

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

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

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

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

con $m<n$, es decir, en número menor que el número de puntos del soporte, el problema de determinar las $p(x_i)=y_i,\ i=0,1,\ldots,n-1,\ n$, 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*.

En lo que sigue consideramos el ajuste de una función en un intervalo cerrado como soporte, utilizando como base del ajuste un conjunto de funciones ortogonales en dicho intervalo, los polinomios de Tchebychef, y determinaremos los coeficientes del polinomio generalizado del ajuste minimizando la norma euclidiana del vector de errores, esto es, del vector definido por las diferencias entre los valores dados en los puntos del soporte por la función a ajustar y los valores que en tales puntos toma el polinomio generalizado.

2. Los polinomios de Tchebycheff:

Se trata de los polinomios descubiertos por el matemático ruso Pafnuti Lvóvich Chebycheff (1821-1894), que pueden definirse por

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

y podemos comprobar que son soluciones de la ecuación diferencial de segundo orden

$$(1-x^2)y'' - xy' + n^2 y = 0$$

ya que haciendo $\theta = \arccos x \rightarrow x = \cos\theta$ será $T_n(x) = \cos n\theta,\quad dT_n(x) = -nsenn\theta.d\theta$, con $dx = -sen\theta.d\theta \rightarrow \frac{d\theta}{dx} = \frac{-1}{sen\theta}$ y si llamamos $y = T_n(x)$ será

$$y' = \frac{d}{dx}T_n(x) = -nsenn\theta\frac{d\theta}{dx} = \frac{nsenn\theta}{sen\theta}$$

resultando para la derivada segunda:

$$y'' = \frac{n^2\cos n\theta.sen\theta - \cos\theta senn\theta}{sen^2\theta}\frac{d\theta}{dx} = \frac{-n^2\cos n\theta + nsenn\theta\cot\theta}{sen^2\theta}$$

con lo que al deshacer cambios quedará:

$$y'' = \frac{-n^2 y}{1-x^2} + \frac{xy'}{1-x^2} \text{ , o sea, } (1-x^2)y'' - xy' + n^2 y = 0$$

Determinación de todos los polinomios:

Los polinomios de Tchebycheff se pueden determinar fácilmente desde expresiones simples de recurrencia. Así, llamando $\theta = \arccos x$, se tiene:

$$T_{-n}(x) = \cos(-n.\theta) = \cos(n.\theta) = T_n(x)$$

$$\left.\begin{array}{l} T_{m+n}(x) = \cos(m+n)\theta \\ T_{m-n}(x) = \cos(m-n)\theta \end{array}\right\} \rightarrow T_{m+n}(x) + T_{m-n}(x) = \cos(m+n)\theta + \cos(m-n)\theta =$$

$$= 2\cos m\theta\cos n\theta = 2T_m(x).T_n(x) \rightarrow T_{m+n}(x) + T_{m-n}(x) = 2T_m(x).T_n(x)$$

Y para n=1: $T_{m+1}(x) + T_{m-1}(x) = 2T_m(x).T_1(x)$, de donde

$$T_{m+1}(x) = 2T_m(x).T_1(x) - T_{m-1}(x)$$

Expresión recurrente que permite determinar ya todos los polinomios:

$T_0(x) = \cos(0.\arccos x) = \cos 0 = 1$
$T_1(x) = \cos(1.\arccos x) = \cos(\arccos x) = x$
$T_2(x) = 2xT_1(x) - T_0(x) = 2x^2 - 1$
$T_3(x) = 2xT_2(x) - T_1(x) = 4x^3 - 3x$
$T_4(x) = 2xT_3(x) - T_2(x) = 2x(4x^3 - 3x) - 2x^2 + 1 = 8x^4 - 8x^2 + 1$
… … … … … …… … …
… … … … … …… … …

Raíces:
Las n raíces del polinomio $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$ son los n puntos pertenecientes al intervalo [-1,1] dados por $x_j = \cos\left(\frac{2j+1}{2n}\pi\right),\ j = 0,1,2,...,n-1$

En efecto:

$$T_n(x_j) = \cos(n \arccos x_j) = \cos\left(n.\arccos\left(\cos\left(\frac{2j+1}{2n}\pi\right)\right)\right) = \cos\left(n\left(\frac{2j+1}{2n}\pi\right)\right) = \cos\left((2j+1)\frac{\pi}{2}\right) = 0$$

(ya que $(2j+1)\frac{\pi}{2}$ es un número impar de veces el primer cuadrante, es decir, es un número impar de veces 90º, y tiene, por tanto, coseno nulo).

3. Ortogonalidad en un intervalo cerrado:

Resultan ser ortogonales en el intervalo [-1,1] con función de peso $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, ya que se verifica que

$$\int_{-1}^{1} T_j(x).T_k(x)\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \begin{cases} 0 & si\ j \neq k \\ \pi/2 & si\ j = k \neq 0 \\ \pi & si\ j = k = 0 \end{cases}$$

en efecto:

$$\int_{-1}^{1} T_j(x).T_k(x).\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \int_{\pi}^{0} \cos j\theta.\cos k\theta.(-d\theta) = \int_{0}^{\pi} \cos j\theta \cos k\theta.d\theta =$$

$$= \frac{1}{2}\int_{0}^{\pi} \left[\cos(j+k)\theta + \cos(j-k)\theta\right].d\theta = \frac{1}{2}\left[\frac{sen(j+k)\theta}{j+k} + \frac{\cos(j-k)\theta}{j-k}\right]\Bigg|_{0}^{\pi}$$

$$si\ j \neq k: \int_{-1}^{1} T_j(x).T_k(x).\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{1}{2}(0+0) = 0$$

$$si\ j = k \neq 0: \int_{-1}^{1} T_j^2(x).\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \int_0^{\pi} \cos^2 j\theta.d\theta = \frac{1}{2}\int_0^{\pi}(1+\cos 2j\theta.d\theta = \frac{1}{2}\int_0^{\pi} d\theta +$$

$$+\frac{1}{2}\int_0^{\pi}\cos 2j\theta.d\theta = \frac{1}{2}\theta\Big|_0^{\pi} + \frac{1}{2}\frac{sen2j\theta}{2j}\Bigg|_0^{\pi} = \frac{\pi}{2}+\frac{1}{2}0 = \frac{\pi}{2}$$

$$si\ j = k = 0: \int_{-1}^{1} T_0^2(x).\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \int_{-1}^{1}\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \int_0^{\pi} d\theta = \theta\Big|_0^{\pi} = \pi$$

4. Ortogonalidad en un conjunto discreto de puntos del intervalo [-1,1]:
Si consideramos los n puntos del intervalo que son raíces del polinomio $T_n(x)$:

$$x_j = \cos\left(\frac{2j+1}{2n}\pi\right),\ \ j = 0,1,2,...,n-1$$

$$\arccos x_j = \frac{2j+1}{2n}\pi,\ \ j = 0,1,2,...,n-1$$

podemos comprobar que los polinomios de Tchebycheff de grado inferior a n son ortogonales sobre tal soporte:

$$\sum_{j=0}^{n-1} T_p(x_j).T_q(x_j) = \sum_{j=0}^{n-1}\cos(p\arccos x_j).\cos(q\arccos x_j) =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{j=0}^{n-1}\left[\cos((p+q)\arccos x_j) + \cos((p-q)\arccos x_j)\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{0}^{n-1}\left[\cos((p+q)\frac{2j+1}{2n}\pi) + \cos((p-q)\frac{2j+1}{2n}\pi)\right] =$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{0}^{n-1}\left[\cos(2j+1)\phi_{p+q} + \cos(2j+1)\phi_{p-q}\right],\ siendo\ \ \phi_{p+q} = \frac{p+q}{2n}\pi,\ \ \phi_{p-q} = \frac{p-q}{2n}\pi \quad [4\_1]$$

Para continuar el proceso de comprobación de la ortogonalidad, hemos de estudiar, por tanto, la función

$$\varphi(z) = \cos\left(z\frac{2j+1}{2n}\pi\right),\ \ j = 0,1,...,n-1$$

llamando $\phi = z\pi/2n$, se tendrá:

$$\cos\left(z\frac{2j+1}{2n}\pi\right) = \cos(2j+1)\phi = real\left\{e^{(2j+1)\phi i}\right\} \rightarrow \sum_{j=0}^{n-1}\cos\left(z\frac{2j+1}{2n}\pi\right) = real\sum_{j=0}^{n-1}e^{(2j+1)\phi i} =$$

$$= real\frac{e^{(2(n-1)+1)\phi i}.e^{2\phi i}-e^{\phi i}}{e^{2\phi i}-1} = real\left[e^{\phi i}\frac{e^{2n\phi i}-1}{e^{2\phi i}-1}\right]$$

- Si $e^{2\phi i}\neq 1$ nos encontramos con dos alternativas:

a) que z sea impar: en este caso $2n\phi i = 2n\frac{z\pi}{2n}i = z\pi i \to e^{2n\phi i}=e^{z\pi i}=-1$, quedando:

$$\sum_{j=0}^{n-1}\cos\left(z\frac{2j+1}{2n}\pi\right) = real\left[e^{\phi i}\frac{-1-1}{e^{2\phi i}-1}\right] = -2.real\frac{e^{\phi i}}{e^{2\phi i}-1} = -2.real\frac{e^{\phi i}\left(e^{-2\phi i}-1\right)}{\left(e^{2\phi i}-1\right)\left(e^{-2\phi i}-1\right)} =$$

$$= -2real\frac{e^{-\phi i}-e^{\phi i}}{1-e^{2\phi i}-e^{-2\phi i}+1} = -2real\frac{(\cos\phi - isen\phi)-(\cos\phi + isen\phi)}{2-2\cos 2\phi} = -2real\frac{-2isen\phi}{2-2\cos 2\phi} = 0$$

b) que z sea par: en este caso $2n\phi i = 2n\frac{z\pi}{2n}i = z\pi i \to e^{2n\phi i}=e^{z\pi i}=1$, con lo cual:

$$\sum_{j=0}^{n-1}\cos\left(z\frac{2j+1}{2n}\pi\right) = real\left[e^{\phi i}\frac{1-1}{e^{2\phi i}-1}\right] = 0$$

- Si $e^{2\phi i}=1$ entonces ha de ser $2\phi i = 2k\pi i$, o sea, $\phi = k\pi \to z\pi/2n = k\pi \to z = 2nk$, con lo que:

$$\sum_{j=0}^{n-1}\cos\left(z\frac{2j+1}{2n}\pi\right) = real\sum_{j=0}^{n-1}e^{(2j+1)\phi i} = real\sum_{j=0}^{n-1}\left(e^{2j\phi i}.e^{\phi i}\right) = real\sum_{j=0}^{n-1}\left(e^{2jk\pi i}.e^{k\pi i}\right) =$$

$$= real\sum_{j=0}^{n-1}\left(1.(-1)^k\right) = n.(-1)^k$$

En resumen:

$$\sum_{j=0}^{n-1}\cos(2j+1)\phi = \begin{cases} 0 & si\ \phi \neq 2kn \\ n.(-1)^k & si\ \phi = 2kn \end{cases}$$

Con lo que ya podemos terminar de comprobar la ortogonalidad desde [4_1]:

Si $p \neq q \to \phi_{p+q} = \frac{p+q}{2n}\pi \neq 2kn\ y\ \phi_{p-q} = \frac{p-q}{2n}\pi \neq 2kn$, por lo que:

$$\frac{1}{2}\sum_{0}^{n-1}\left[\cos(2j+1)\phi_{p+q} + \cos(2j+1)\phi_{p-q}\right] = 0+0 = 0$$

Si $p = q \neq 0 \to \phi_{p+q} = \frac{2p}{2n}\pi = \frac{p}{n}\pi \neq 2kn,\ \phi_{p-q} = \frac{p-q}{2n}\pi = 0 = 2kn\ \ (k=0)$, entonces:

$$\frac{1}{2}\sum_{0}^{n-1}\left[\cos(2j+1)\phi_{p+q} + \cos(2j+1)\phi_{p-q}\right] = \frac{1}{2}\left[0+(-1)^0.n\right] = \frac{n}{2}$$

Si $p = q = 0 \to \phi_{p+q} = \frac{0}{2n}\pi = 0 = 2kn,\ \phi_{p-q} = \frac{0}{2n}\pi = 0 = 2kn\ \ (k=0)$, resultando:

$$\frac{1}{2}\sum_{0}^{n-1}\left[\cos(2j+1).0 + \cos(2j+1).0\right] = \frac{1}{2}\left[(-1)^0.n + (-1)^0.n\right] = n$$

en definitiva:

$$\sum_{j=0}^{n-1} T_p(x_j).T_q(x_j) = \begin{cases} 0 & p \neq q \\ n/2 & p = q \neq 0 \\ n & p = q = 0 \end{cases}$$

5. Ajuste:

a) Ajustando en el intervalo [-1,1] con función de peso $1\big/\sqrt{1-x^2}$:

Si se pretende ajustar la función $y = f(x),\ \forall x \in [-1,1]$ mediante una combinación lineal de polinomios de Tchebycheff, se tiene para la función de ajuste:

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n-1} c_k T_k(x)$$

donde hemos de elegir los coeficientes c_k de modo que sea mínimo el error que se cometa en el ajuste.

Consideremos el error cometido en cada punto del intervalo:

$$e(x) = y - p(x) = y - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x)$$

y su cuadrado $e(x)^2 = \left(y - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x) \right)^2$

La norma euclidiana del vector de errores, al cuadrado, es la suma de los cuadrados de los errores en todos los puntos del intervalo:

$$|e|^2 = \int_{-1}^{1} e(x)^2.dx = \int_{-1}^{1} \left(y - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x) \right)^2 .dx$$

Puesto que la norma euclidiana del vector de errores ha de ser mínima para los coeficientes de la función de ajuste construida, se tendrá:

$$\frac{\partial}{\partial c_k} |e|^2 = 0,\ \ k = 0,1,\dots,n-1$$

Por tanto:

$$\frac{\partial}{\partial c_k}|e|^2 = \frac{\partial}{\partial c_k}\int_{-1}^{1}\left(y - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x) \right)^2 .dx = 2\int_{-1}^{1}\left(y - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x) \right)\frac{\partial}{\partial c_k}\left(y - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x) \right).dx =$$

$$= 2\int_{-1}^{1}\left(y - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x) \right)\left(-T_k(x)\right).dx = 2\sum_{j=0}^{n-1} c_j \int_{-1}^{1} T_j(x)T_k(x).dx - 2\int_{-1}^{1} y.T_k(x)dx = 0$$

o bien:

$$\sum_{j=0}^{n-1} c_j \int_{-1}^{1} T_j(x)T_k(x).dx = \int_{-1}^{1} y.T_k(x)dx$$

por lo que, salvo una constante aditiva, es

$$\sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x) T_k(x) = y.T_k(x)$$

pudiendo expresar, dividiendo por $\sqrt{1-x^2}$ ambos miembros:

$$\frac{\sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x) T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{y.T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}}$$

de lo cual, se tiene

$$\sum_{j=0}^{n-1} c_j \int_{-1}^{1} \frac{T_j(x).T_k(x).dx}{\sqrt{1-x^2}} - \int_{-1}^{1} \frac{y.T_k(x).dx}{\sqrt{1-x^2}} = 0$$

que, por la ortogonalidad de los polinomios de Tchebychef, es:

$$c_k \frac{\pi}{2} - \int_{-1}^{1} \frac{y.T_k(x).dx}{\sqrt{1-x^2}} = 0$$

por tanto:

$$c_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^{1} \frac{f(x).T_k(x).dx}{\sqrt{1-x^2}}, \; k = 0,1,...,n-1$$

en definitiva, la función de ajuste resulta ser:

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{2}{\pi} \int_{-1}^{1} \frac{f(x).T_k(x)dx}{\sqrt{1-x^2}} \right) T_k(x)$$

b) Ajustando sobre las raíces del polinomio $T_n(x)$:

Si se pretende ajustar la función f(x) mediante una combinación lineal de n polinomios de Tchebycheff, $T_0(x),...,T_{n-1}(x)$, sobre el soporte dado por las raíces del polinomio $T_n(x)$, se tiene para la función de ajuste:

$$p(x) = \sum_{h=0}^{n-1} c_h T_h(x)$$

obteniéndose los coeficientes minimizando la norma euclidiana, como en el caso anterior. El error en cada punto (x_k, y_k) del soporte es

$$e_k = y_k - p(x_k) = y_k - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x_k) \rightarrow e_k^2 = \left(y_k - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x_k) \right)^2$$

$$\frac{\partial}{\partial c_h} |e|^2 = \frac{\partial}{\partial c_h} \sum_{k=0}^{n-1} e_k^2 = \frac{\partial}{\partial c_h} \sum_{k=0}^{n-1} \left(y_k - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x_k) \right)^2 = 2 \sum_{k=0}^{n-1} \left(y_k - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x_k) \right) \frac{\partial}{\partial c_h} \left(y_k - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x_k) \right) =$$

$$= 2 \sum_{k=0}^{n-1} \left(y_k - \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j(x_k) \right) \left(-T_h(x_k) \right) = 2 \sum_{j=0}^{n-1} c_j \sum_{k=0}^{n-1} T_j(x_k) T_h(x_k) - 2 \sum_{k=0}^{n-1} y_k T_h(x_k) = 2.\frac{n}{2} c_h = 2 \sum_{k=0}^{n-1} y_k T_h(x_k) \rightarrow$$

$$\rightarrow c_h = \frac{1}{n/2} \sum_{k=0}^{n-1} f(x_k).T_h(x_k)$$

De ser

$$x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2n}\pi\right) \rightarrow T_h(x_k) = \cos\left(h\arccos(x_k)\right) = \cos\left(h\arccos\left(\cos\left(\frac{2k+1}{2n}\pi\right)\right)\right) =$$

$$= \cos\left(h\frac{2k+1}{2n}\pi\right)$$

o sea:

$$c_h = \frac{1}{n/2}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_k).T_h(x_k) = \frac{2}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_k).\cos\frac{2k+1}{2n}h\pi,\ \ h = 0,1,...,n-1$$

Función de ajuste:

$$p(x) = \sum_{h=0}^{n-1}\left(\frac{2}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f(x_k).\cos\frac{2k+1}{2n}h\pi\right)T_h(x)$$

Se observa que cada coeficiente $c_h, h = 0,1,...,n-1$, depende de n. No se puede sumar otro término al desarrollo que constituye la función de ajuste para ser mejorado. Todos los coeficientes cambian si alteramos el grado n.

6. 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

Chinea, C. S., Ajuste de funciones. El método de los mínimos cuadrados (http://casanchi.com/mat/ajustemc01.htm)

Chinea, C. S., Ajuste de funciones. Ajuste con polinomios ortogonales (http://casanchi.com/mat/ajustepo01.htm)

Chinea, C. S., Ajuste de funciones. Ajuste con funciones ortogonales (http://casanchi.com/mat/ajustefo01.htm)