

Lección 6

Problemas de mínimos cuadrados

6.1 Aproximación en un espacio con producto interno

El grupo más importante de problemas de aproximación se refiere a situaciones donde el espacio ambiente X es un espacio con producto interno. Tales problemas se llaman, a veces, de mínimos cuadrados, por razones que serán obvias más tarde.

Si X es un espacio vectorial real, un *producto interno* en X es una aplicación definida en $X \times X$ y con valores reales $(f, g) \rightarrow \langle f, g \rangle$, tal que sea

(i) *Bilineal*: Para cada f_1, f_2, g en X y cada α_1, α_2 reales

$$\begin{aligned}\langle \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2, g \rangle &= \alpha_1 \langle f_1, g \rangle + \alpha_2 \langle f_2, g \rangle, \\ \langle g, \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 \rangle &= \alpha_1 \langle g, f_1 \rangle + \alpha_2 \langle g, f_2 \rangle.\end{aligned}$$

(ii) *Simétrica*: $\langle f, g \rangle = \langle g, f \rangle$ para cada $f, g \in X$.

(iii) *Definida positiva*: para cada $f \neq 0$, $\langle f, f \rangle > 0$.

6.1.1 Ejemplo. En \mathbb{R}^n

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^T \mathbf{y} = \sum_{i=1}^n x_i y_i \tag{6.1}$$

define el producto interno usado habitualmente. Más generalmente, a cada matriz real $n \times n$ simétrica y definida positiva A le corresponde un producto interno dado por

$$\mathbf{x}^T A \mathbf{y} = \sum_{i,j=1}^n x_i a_{ij} y_j$$

Todos los productos internos en \mathbb{R}^n son de esta forma (*¿por qué?*). Concretamente si A es una matriz diagonal de elementos positivos (normalmente denominados $\omega_i, i = 1, \dots, n$) estamos ante un producto escalar ponderado,

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_\omega = \sum_{i=1}^n \omega_i x_i y_i$$

donde cada componente tiene un peso diferente en el resultado final.

6.1.2 Ejemplo. En el conjunto de las funciones reales continuas en $0 \leq x \leq 1$, la expresión

$$\int_0^1 f(x)g(x)dx$$

define un producto interno. Demostrar que esto es cierto, y tratar de definir otros productos internos en espacios de funciones. Por ejemplo, un equivalente de los productos ponderados discretos para el espacio de las funciones continuas en $-1 \leq x \leq 1$ son productos internos de la forma

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 \omega(x)f(x)g(x)dx$$

donde $\omega(x)$ es una función estrictamente positiva en todo el intervalo (véase el apartado 8.1).

6.1.3 Un resultado clave en el estudio de los espacios con producto interno es la llamada desigualdad de Cauchy - Schwarz que afirma que, cualesquiera que sean f y g en X

$$|\langle f, g \rangle| \leq \sqrt{\langle f, f \rangle} \sqrt{\langle g, g \rangle}$$

(véase ejercicio 6.4.2). Como consecuencia se tiene que

$$\sqrt{\langle f + g, f + g \rangle} \leq \sqrt{\langle f, f \rangle} + \sqrt{\langle g, g \rangle},$$

desigualdad de Minkowski (véase el ejercicio 6.4.3). A su vez esta nueva desigualdad permite probar de modo inmediato que la aplicación $\sqrt{\langle f, f \rangle}$ define una norma en X (ejercicio 6.4.4). Por consiguiente, todo espacio con producto interno es, de modo natural, un espacio normado, y tiene sentido en él hablar de distancias. En particular, podremos plantear en él problemas de aproximación.

Por otro lado, en los espacios con producto interno hay una gama de conceptos que carecen de sentido en espacios normados generales. El concepto específico más destacado es el de *ortogonalidad*: dos vectores de X se dicen *ortogonales* si su producto interno es nulo. Claramente esta relación es simétrica. Un subconjunto S de X se dice *ortogonal* si sus vectores son dos a dos ortogonales. Un subconjunto *ortonormal* es un subconjunto *ortogonal* en el que todos los vectores tienen norma unidad.

El concepto de ortogonalidad generaliza a espacios como el del ejemplo 6.1.2 la noción elemental de perpendicularidad del espacio común (ejercicio 6.4.5), lo que permite utilizar algunos resultados útiles basados en dicho concepto, como por ejemplo la relación de Pitágoras (una versión analítica del famoso teorema), que nos asegura que si dos vectores \mathbf{x} e \mathbf{y} son ortogonales, se verifica

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2$$

que sería bueno que el lector tratase de probar.

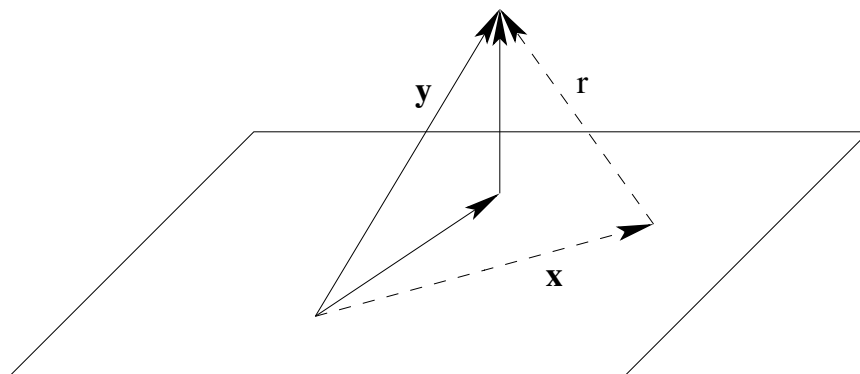


Figura 6.1: Ilustración geométrica de los mínimos cuadrados

6.1.4 En el caso de que la norma derive de un producto interno es fácil dar una *caracterización* de la mejor aproximación, es decir obtener un criterio que nos permita reconocer si un elemento dado es la mejor aproximación o no.

TEOREMA

Sea X un espacio con producto interno, S un subespacio de X , f un elemento de X . Si existe p^* , aproximación óptima a f por elementos de S , entonces tal mejor aproximación es única y satisface:

$$f - p^* \text{ es ortogonal a cada } p \text{ de } S \quad (6.2)$$

Recíprocamente si un elemento p^* satisface la condición anterior, es la mejor aproximación.

Demostración. Sea p^* la mejor aproximación. Fijemos p en S . Para cada α real

$$\begin{aligned} \|f - p^*\|^2 \leq \|f - (p^* + \alpha p)\|^2 &= \langle (f - p^*) - \alpha p, (f - p^*) - \alpha p \rangle \\ &= \|f - p^*\|^2 - 2\alpha \langle f - p^*, p \rangle + \alpha^2 \|p\|^2. \end{aligned}$$

Así el 'trinomio' $\alpha \rightarrow \alpha^2 \|p\|^2 - 2\alpha \langle f - p^*, p \rangle$ toma sólo valores no negativos. Su discriminante $4 \langle f - p^*, p \rangle^2$ será ≤ 0 . Como también es ≥ 0 será nulo y por ello $f - p^*$ ortogonal a p .

Recíprocamente, si vale la condición (6.2) y $p \in S$, $p \neq p^*$,

$$\begin{aligned} \|f - p\|^2 &= \|(f - p^*) + (p^* - p)\|^2 \\ &= \|f - p^*\|^2 + 2 \langle f - p^*, p^* - p \rangle + \|p^* - p\|^2 \\ &= \|f - p^*\|^2 + \|p^* - p\|^2 > \|f - p^*\|^2 \end{aligned}$$

luego p^* es una mejor aproximación y no puede haber otra. \square

6.2 Aproximación en subespacios de dimensión finita

Si S es de *dimensión finita* la relación (6.2) da un medio práctico para calcular p^* (que existe, proposición 5.3.7). En efecto, tomemos una base g_0, g_1, \dots, g_n de S . Encontrar p^* es encontrar los escalares α_i , $i = 0, 1, \dots, n$ tales que

$$p^* = \sum_{i=0}^n \alpha_i g_i$$

Para que se verifique (6.2) se necesita y basta que $f - p^*$ sea ortogonal a cada g_i , $i = 0, 1, \dots, n$ (ejercicio 6.4.7). Por tanto los α_i quedan caracterizados por

$$\langle f - \sum_{i=0}^n \alpha_i g_i, g_j \rangle = 0, \quad j = 0, 1, \dots, n$$

ó

$$\sum_{i=0}^n \langle g_i, g_j \rangle \alpha_i = \langle f, g_j \rangle, \quad j = 0, 1, \dots, n \quad (6.3)$$

Las ecuaciones (6.3) se llaman *ecuaciones normales* del problema. La matriz del sistema $\{\langle g_i, g_j \rangle\}_{i,j=0,1,\dots,n}$ (que es la misma para todas las $f \in X$), se llama matriz de Gram de los vectores g_i . Puesto que (6.3) tiene solución única (¿por qué?) la matriz de Gram ha de resultar *regular*.

6.2.1 Ejemplo. Hallemos, en $0 \leq x \leq 1$ la mejor aproximación a la función exponencial por un polinomio de grado ≤ 2 , respecto del producto interno usual (el del ejemplo 6.1.2). La mejor aproximación es $a + bx + cx^2$, se determina imponiendo que $e^x - (a + bx + cx^2)$ sea ortogonal a los elementos de la base $1, x, x^2$, es decir imponiendo que

$$\int_0^1 [e^x - (a + bx + cx^2)] x^j dx = 0, \quad j = 0, 1, 2.$$

Esto conduce al sistema de *ecuaciones normales*

$$\begin{aligned} a + \frac{1}{2}b + \frac{1}{3}c &= e - 1 \\ \frac{1}{2}a + \frac{1}{3}b + \frac{1}{4}c &= 1 \\ \frac{1}{3}a + \frac{1}{4}b + \frac{1}{5}c &= e - 2 \end{aligned}$$

con solución $a = 39e - 105$, $b = -216e + 588$, $c = 210e - 570$. Dando los coeficientes con cuatro cifras decimales tras la coma, la mejor aproximación es $1.0130 + 0.8511x + 0.8392x^2$. Por ejemplo en $x = 1$ vale 2.7033, mientras que $e = 2.7183$; en este punto el polinomio cuadrático de Taylor $1 + x + 0.5x^2$ vale 2.5000.

6.2.2 Aplicación a la aproximación en variedades afines. Supongamos que deseamos aproximar la exponencial (en el mismo intervalo con el mismo producto interno que en el ejemplo anterior por elementos del conjunto S^* de polinomios de grado ≤ 2 , que coincidan con la exponencial en $x = 0$ y $x = 1$).

Vemos que S^* no es un subespacio vectorial; sin embargo, si p y q están en S^* , la diferencia $p - q$ está en el conjunto S de polinomios de grado a lo sumo 2 nulos en $x = 0$ y $x = 1$, y S ya es un subespacio vectorial. Por consiguiente S^* es una variedad afín; y, fijado un elemento p_0 de S^* , los elementos de S^* son justamente los de la forma $p_0 + q$ que q recorriendo el subespacio S .

La distancia de $p_0 + q$ a la exponencial es la misma que la de q a $e^x - p_0$ (¿por qué?). Concluimos que la solución del problema es $p_0 + q^*$ siendo q^* la aproximación mejor a $e^x - p_0$ por elementos de S .

Para p_0 podemos tomar cualquier elemento de S^* , pero lo más cómodo será tomar la recta de Newton $1 + (e - 1)x$. La dimensión de S es evidentemente 1, y una base obvia la constituye el polinomio $x(x - 1)$.

Si $q^* = Ax(x - 1)$ es la mejor aproximación a $e^x - p_0$ en S , A se halla imponiendo que $e^x - p_0 - Ax(x - 1)$ sea ortogonal a $x(x - 1)$. Esto da $A = (130e - 350)/4$, de manera que la aproximación buscada es

$$1 + (e - 1)x + \frac{130e - 350}{4}x(x - 1) = 1 + 0.8741x + 0.8442x^2$$

6.2.3 Aplicación a la aproximación funcional discreta. En el caso de que el problema a resolver sea de aproximación funcional discreta (es decir, aproximar una función real en un conjunto finito de puntos $x_k, k = 0, 1, \dots, m$) el espacio X de todas las funciones es de dimensión finita (¿cuál será la dimensión exacta?) y en consecuencia lo mismo ocurre con todos los subespacios, y siempre se puede utilizar esta técnica constructiva de la solución.

En concreto, si el subespacio S tiene una base formada por los vectores $\mathbf{g}_j, j = 0, 1, \dots, n$ con $n \leq m$, y \mathbf{f} es el vector a aproximar (cualquier función en este contexto es simplemente un vector), el error a minimizar admite en esta situación la siguiente expresión

$$\|\mathbf{f} - \sum_{i=0}^n c_i \mathbf{g}_i\|^2 = \langle \mathbf{f} - \sum_{i=0}^n c_i \mathbf{g}_i, \mathbf{f} - \sum_{i=0}^n c_i \mathbf{g}_i \rangle = \sum_{k=0}^m \left[f(x_k) - \sum_{i=0}^n c_i g_i(x_k) \right]^2$$

según (6.1), y que justifica perfectamente el nombre de “mínimos cuadrados”. De hecho utilizando los procedimientos de cálculo infinitesimal para la localización de extremos, al imponer la condición de que las derivadas parciales respecto de los $c_j, j = 0, 1, \dots, n$ sean nulos, se obtienen las relaciones

$$2 \sum_{k=0}^m \left[f(x_k) - \sum_{i=0}^n c_i g_i(x_k) \right] g_j(x_k) = 0, \quad j = 0, 1, \dots, n$$

es decir,

$$\sum_{k=0}^m f(x_k) g_j(x_k) = \sum_{i=0}^n c_i \left[\sum_{k=0}^m g_i(x_k) g_j(x_k) \right], \quad j = 0, 1, \dots, n$$

que en términos del producto interno (6.1), resulta

$$\langle \mathbf{f}, \mathbf{g}_j \rangle = \sum_{i=0}^n c_i \langle \mathbf{g}_i, \mathbf{g}_j \rangle, \quad j = 0, 1, \dots, n$$

que esencialmente son las mismas *ecuaciones normales* (6.3), pero donde al ser X de dimensión finita, todos los elementos implicados aparecen como vectores de \mathbb{R}^{m+1} .

Esta circunstancia permite que se pueda hacer un planteamiento matricial del problema discreto de “mínimos cuadrados”. Si consideramos la matriz A , de dimensión $(m+1) \times (n+1)$ que tiene por columnas los vectores $\mathbf{g}_j, j = 0, 1, \dots, n$ y $\mathbf{c} = (c_0, c_1, \dots, c_n)^T$, las ecuaciones normales resultan ser

$$A^T A \mathbf{c} = A^T \mathbf{f}$$

teniendo en cuenta que el producto de la fila i -ésima de A^T por la columna j -ésima de A no es otra cosa que el producto escalar interno (6.1) de los vectores \mathbf{g}_i y \mathbf{g}_j , que es precisamente el elemento ij -ésimo de la matriz de Gram.

Observaciones: Conviene notar que aunque la matriz A pueda ser rectangular (si m y n son diferentes), $A^T A$ es cuadrada y regular (¿por qué?) de dimensión $n+1$.

Si A fuese cuadrada (y regular), esto significa que el subespacio S tiene la misma dimensión que todo el espacio, por lo que evidentemente vamos a encontrar unos coeficientes $c_i, i = 0, 1, \dots, m$, tales que $\mathbf{f} = \sum_{i=0}^n c_i \mathbf{g}_i$, en cuyo caso la suma de los cuadrados es cero porque en los puntos de la red coincide con el aproximante, que es de hecho un interpolante en el sentido que vimos en los capítulos anteriores. Por eso la interpolación se denomina a veces *aproximación exacta*, y aquí hemos visto un enfoque general para abordarla, con independencia de que tipo de función sean los interpolantes.

En este apartado hemos cambiado la notación de los coeficientes de α_i a c_i , porque aún cuando la función a aproximar y el subespacio sean descritos inicialmente de la misma manera, estos coeficientes varían en función de los puntos de discretización, pues la presunta identidad de los datos es sólo aparente debido al fenómeno de ‘*sampling*’ o muestreo, que nos obliga a trabajar con los valores de las funciones en unos pocos puntos, sin que influya para nada su comportamiento en el resto del intervalo.

6.2.4 Ejemplo. Hallemos, en $0 \leq x \leq 1$ la mejor aproximación discreta, en la norma euclídea basada en los puntos $\{0, .25, .5, .75, 1\}$, a la función exponencial por un polinomio de grado ≤ 2 . La mejor aproximación será de nuevo de la forma $a + bx + cx^2$, pero para el cálculo de los coeficientes, los *polinomios* $1, x, x^2$ de la base son en realidad los vectores $(1, 1, 1, 1, 1)^T$, $(0, .25, .5, .75, 1)^T$ y $(0, .0625, .25, .5625, 1)^T$, mientras que la *función* a aproximar es el vector $(1, 1.2840, 1.6487, 2.1170, 2.7183)^T$ de los valores de la función exponencial en la red.

Utilizando la mecánica matricial que acabamos de ver, resulta que el sistema de ecuaciones normales resulta ser

$$\begin{pmatrix} 5 & 2.5 & 1.875 \\ 2.5 & 1.875 & 1.5625 \\ 1.875 & 1.5625 & 1.3828 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8.7680 \\ 5.4514 \\ 4.4015 \end{pmatrix}$$

cuya solución, con cuatro cifras decimales tras la coma, nos proporciona ahora como mejor aproximación $1.0051 + 0.8643x + 0.8435x^2$, que en $x = 1$ vale 2.7130. Como se ve los resultados son diferentes al caso continuo.

6.2.5 Aplicación a los sistemas lineales sobredeterminados. Consideremos el sistema lineal $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ donde A tiene m filas y n columnas. De acuerdo con las consideraciones del apartado 6.2.1, tratamos de hallar \mathbf{x} que minimice la cantidad $\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|$ para alguna norma en \mathbb{R}^m . Se hablaba allí de hallar en una primera etapa un elemento \mathbf{b}^* de la forma $A\mathbf{x}$, es decir combinación lineal de los vectores columna de A , que mejor aproxime a \mathbf{b} , y en una segunda resolver el sistema resultante.

Pero, cuando en \mathbb{R}^m se toma la *norma euclídea usual* recaemos en un problema de mínimos cuadrados. Como trivialmente, los mencionados vectores columna \mathbf{a}_i generan el espacio de sus combinaciones lineales, que es la imagen de la aplicación lineal A , la solución \mathbf{x} del problema existe (¿por qué?), y viene caracterizada por:

$$\langle \mathbf{b} - A\mathbf{x}, \mathbf{a}_i \rangle = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad (6.4)$$

o equivalentemente

$$\langle A\mathbf{x}, \mathbf{a}_i \rangle = \langle \mathbf{a}_i, \mathbf{b} \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

es decir

$$A^T A\mathbf{x} = A^T \mathbf{b}. \quad (6.5)$$

expresión que nos permite calcular \mathbf{x} directamente, sin necesidad de tener previamente \mathbf{b}^* .

Observaciones: Notemos que aunque $A\mathbf{x}$ está únicamente definido (teorema 6.1.4) pudiera muy bien darse que para $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2$, $A\mathbf{x}_1 = A\mathbf{x}_2 = \mathbf{b}^*$. La solución \mathbf{x} será única si y solo si \mathbf{b}^* sólo puede escribirse de una manera como combinación lineal de las columnas \mathbf{a}_i , esto es *si las n columnas de A son linealmente independientes* (en \mathbb{R}^m), lo que sólo puede ocurrir cuando $m \geq n$, número de incógnitas no superior al de ecuaciones.

Como vemos la aproximación discreta de mínimos cuadrados, ocupa un lugar intermedio entre la aproximación funcional continua (de mínimos cuadrados) y la solución euclídea de los sistemas sobredeterminados. Por una parte, podemos escribir directamente la matriz de Gram de la base elegida (única opción posible en la aproximación continua), pero por otra se puede plantear la solución como una combinación lineal de vectores que optimice la aproximación, desembocando en un sistema sobredeterminado y sacar provecho de todas las técnicas matriciales. Veremos la utilidad de este mecanismo a la hora de discretizar una aproximación continua, pues tenemos la posibilidad de seleccionar los puntos del ‘*sampling*’. En otras ocasiones, cuando la función esta tabulada, la discreta es la única opción posible para aproximar.

6.2.6 Ejemplo. En el apartado 6.3.1, dejamos planteado el problema de resolver el sistema:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\ln 2 & 1 \\ -3\ln 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \ln 0.84 \\ \ln 0.57 \end{pmatrix}$$

La “solución” mejor (en norma euclídea), satisfará:

$$\begin{pmatrix} 0 & -\ln 2 & -3\ln 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\ln 2 & 1 \\ -3\ln 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\ln 2 & -3\ln 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \ln 0.84 \\ \ln 0.57 \end{pmatrix}$$

es decir

$$\begin{pmatrix} 10(\ln 2)^2 & -4 \ln 2 \\ -4 \ln 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R \\ M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\ln 2 \ln 0.84 - 3 \ln 2 \ln 0.57 \\ \ln 0.84 + \ln 0.57 \end{pmatrix}$$

Multiplicando por tres la primera ecuación, por $4 \ln 2$ la segunda y sumando, se tiene

$$R = \frac{\ln 0.84 - 5 \ln 0.57}{14 \ln 2}.$$

Así la estimación para $r = 1/R$ (= vida media del Ra 224) será $14 \ln 2 / (\ln 0.84 - 5 \ln 0.57) = 3.68$ (días). (El verdadero valor es 3.64 días.)

6.3 Sistemas ortogonales

Un caso particularmente sencillo en (6.3) es el cuando los elementos g_i forman una base ortogonal: entonces las ecuaciones toman la forma

$$\|g_j\|^2 \alpha_j = \langle f, g_j \rangle, \quad j = 0, 1, \dots, n;$$

con lo que

$$p^* = \sum_{j=0}^n \frac{\langle f, g_j \rangle}{\|g_j\|^2} g_j. \quad (6.6)$$

Todavía, a efectos teóricos, se suelen normalizar los elementos de la base, multiplicándolos por el inverso de su norma para que tengan norma unidad. Si los g_i son una base ortonormal, (6.6) se simplifica, $p^* = \sum \langle f, g_i \rangle g_i$. En el caso particular en que X es de dimensión finita y S es todo el espacio, se tiene evidentemente que, para cada f de X , $p^* = f$, y por ello $f = \sum \langle f, g_i \rangle g_i$; expresión bien conocida de un vector en una base ortonormal. Con todo, el usar bases ortonormales en vez de simplemente ortogonales suele tener más bien interés teórico; para el cálculo efectivo no es ni necesario ni útil normalizar los elementos de las bases ortogonales.

Observaciones: Las ventajas de utilizar bases ortogonales son grandes. Como acabamos de ver, la primera de ellas es que no hemos de resolver ningún sistema lineal para tener la solución de las ecuaciones normales, ya que la matriz de Gram es diagonal.

Esta misma condición, hace que sea muy económico el cálculo de la propia matriz (de hecho no hace falta especificarla como tal), y si bien es cierto que para cada problema de aproximación sólo hemos de calcularla una vez, la reducción de n^2 productos escalares a n es muy notable, especialmente en el caso de la aproximación continua donde estos productos requieren operaciones analíticas y no sólo numéricas.

Pero la consecuencia más importante del uso de bases ortogonales en el subespacio aproximante es la permanencia de la aproximación ya calculada cuando se quiere mejorar la aproximación. Esto quiere decir que si la aproximación expresada en (6.6) no es suficientemente buena para nuestras necesidades, para mejorarla basta añadir el término siguiente correspondiente al siguiente elemento ortogonal de la base (que amplía el espacio de aproximantes) sin tener que modificar para nada los coeficientes ya calculados. Cuando la base no es ortogonal, esto es imposible: la mejora de la aproximación mediante la ampliación del conjunto de aproximantes, exige recalcular todos los coeficientes, el trabajo hecho anteriormente se pierde.

6.3.1 Ejemplo. Volviendo al ejemplo 6.2.1, si hubiesemos calculado las mejores aproximaciones de grados 0 y 1, los resultados hubiesen sido $a = e - 1 = 1.7183$ para el primer caso, y el resultado de resolver el sistema 2×2

$$\begin{aligned} a + \frac{1}{2}b &= e - 1 \\ \frac{1}{2}a + \frac{1}{3}b &= 1 \end{aligned}$$

para el segundo (¿por qué?). Es decir $a = 0.8731$ y $b = 1.6903$. Como vemos el valor de a cambia en las dos ocasiones que cambiamos de orden de aproximación y el de b en la única que puede. Es evidente que el sistema a resolver es distinto cada vez.

En cambio, si para formar la base del espacio de polinomios de primer grado tomamos $1 - 2x$ (junto al constante 1), resulta que el sistema de ecuaciones normales, ahora quedará (omitiendo los ceros procedentes de la ortogonalidad)

$$\begin{aligned} a + &= e - 1 \\ + \frac{1}{3}b &= e - 3 \end{aligned}$$

cuyo resultado ahora es $b = 3*(e-3) = -0.8452$ (con a el mismo que para la aproximación de grado 0). En resumen el polinomio de grado 1, mejor aproximante en el sentido de los mínimos cuadrados, se puede escribir como

$$1.7183 - 0.8452(1 - 2x)$$

que es el mismo obtenido anteriormente, pero donde gracias a la ortogonalidad de los elementos de la base, sólo hemos tenido que calcular el coeficiente b , en lugar de tener que recalcular ambos mediante un nuevo sistema de ecuaciones.

Si ahora conseguimos encontrar un polinomio de segundo grado ortogonal a los dos utilizados (ejercicio 6.4.5), bastará obtener un único coeficiente, y al añadir el término correspondiente al polinomio de grado 1 que ya tenemos. Volveremos a obtener la solución del ejemplo 6.2.1, pero de una forma progresiva. Este es el sentido y la ventaja de la *permanencia* cuando se usan bases ortogonales. La dificultad está en calcularlas.

6.3.2 Sistema trigonométrico. Aunque es posible construir de forma sistemática conjuntos ortogonales para cualquier problema de aproximación que se nos presente, resulta fundamental desde el punto de vista práctico disponer de familias ortogonales explícitas y sencillas de manejar.

Un ejemplo muy importante por su utilidad práctica lo constituye la familia de funciones

$$1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots, \cos kx, \sin kx, \dots$$

que son ortogonales en $[-\pi, \pi]$ con el producto escalar habitual

$$(f, g) = \int_{-\pi}^{\pi} f(x)g(x)dx$$

En efecto, es inmediato probar (se deja la demostración como un ejercicio) que

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \cos jx \cos kx dx &= \begin{cases} 0 & j \neq k \\ \pi & j = k \neq 0 \\ 2\pi & j = k = 0 \end{cases} \\ \int_{-\pi}^{\pi} \sin jx \sin kx dx &= \begin{cases} 0 & j \neq k \\ \pi & j = k = 1, 2, \dots \end{cases} \\ \int_{-\pi}^{\pi} \cos jx \sin kx dx &= 0 \quad j, k = 0, 1, 2, \dots \end{aligned}$$

donde además se observa el valor de las normas (al cuadrado) de las funciones. Todas valen todas π , excepto para la constante que vale 2π .

En virtud de (6.6), los coeficientes del polinomio trigonométrico de grado n

$$S_n(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^n (a_k \cos kx + b_k \sin kx)$$

que representa la mejor aproximación en mínimos cuadrados dentro del subespacio de dimensión $2n + 1$ generado por las funciones implicadas, serán

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos kx dx, \quad k \geq 0 \quad (6.7)$$

$$b_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin kx dx, \quad k \geq 1 \quad (6.8)$$

teniendo en cuenta que el coeficiente de la función constante 1, tiene que ser $\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx$ que es claramente el *promedio* de la función en el intervalo (¿por qué?). Para mejorar la aproximación basta con añadir más términos al polinomio sin modificar los anteriores.

Observaciones: Los coeficientes a_k y b_k pueden calcularse para cualquier función, y por consiguiente se puede construir una suma infinita denominada serie de Fourier correspondiente o asociada a la función

$$f(x) \sim \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx) \quad (6.9)$$

La forma en que esta serie converge a la función es un interesante problema de análisis en el que no entraremos de momento. Es evidente que en (6.9) no es posible establecer la igualdad en todo caso, pues el segundo miembro es periódico aunque no lo sea el primero. Sí debemos saber que la serie de Fourier converge en norma cuadrática a la función (sea ésta periódica o no, pero perteneciente a $L^2[-\pi, \pi]$). Además, que toda función periódica en $[-\pi, \pi]$ y continua se puede aproximar uniformemente por polinomios trigonométricos, y que si la función tiene derivada continua, la serie de Fourier converge uniformemente.

6.4 Cuestiones y problemas

6.4.1 Describa geoméricamente el subconjunto de \mathbb{R}^n , $\{\mathbf{x} : \|\mathbf{x}\|_A = 1\}$, siendo $\|\cdot\|_A$ la norma inducida por una matriz real, simétrica, definida positiva A (cf. ejemplo 6.1.1).

6.4.2 Pruebe la desigualdad de Cauchy-Schwarz. (Indicación: fije f, g ; la función real de variable real $F(\alpha) = \langle f + \alpha g, f + \alpha g \rangle$ sólo toma valores no negativos; muestre que F es un trinomio de segundo grado en α ; su discriminante no puede ser positivo.)

6.4.3 Pruebe la desigualdad de Minkowski.

6.4.4 Pruebe que si $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es un producto interno en X , entonces $\sqrt{\langle f, f \rangle}$ define una norma en X .

6.4.5 En el espacio del ejemplo 6.1.2, construya tres polinomios, de grados 1,2,3 respectivamente y que sean dos a dos ortogonales.

6.4.6 Pruebe que todo subconjunto ortogonal que no contenga al vector nulo es libre. En particular los conjuntos ortonormales son libres.

6.4.7 Pruebe que un vector es ortogonal a cada vector de un subconjunto C si y solo si lo es a cada vector del subespacio que C genera.

6.4.8 Matriz de Gram. Sean g_0, g_1, \dots, g_n vectores cualesquiera de un espacio con producto interno. Por definición su matriz de Gram es la matriz G de elementos $\{\langle g_i, g_j \rangle\}$. Pruebe, sin utilizar resultados de teoría de la aproximación, que G es regular si y sólo si los g_i son linealmente independientes.

6.4.9 Obtener el sistema (6.3) por procedimientos del cálculo infinitesimal, imponiendo las condiciones de minimización a la función real $F(\alpha_0, \dots, \alpha_n) = \|f - \sum \alpha_i g_i\|_2^2$.

6.4.10 Matriz de Hilbert. En el espacio del ejemplo 6.1.2, halle la matriz de Gram de los elementos $1, x, \dots, x^n$. Tal matriz, llamada de Hilbert, es el ejemplo clásico de matriz mal acondicionada.

6.4.11

a) Encontrar la recta que mejor ajusta a los datos de la siguiente tabla en el sentido de los mínimos cuadrados, suponiendo que los valores de x están libres de error:

x	1	2	3	4	5	6
y	2.04	4.12	5.64	7.18	9.20	12.04

(Los datos están tabulados a partir de la ecuación $y = 2x$, con perturbaciones obtenidas de una tabla de números aleatorios).

b) Demostrar que el punto cuya coordenada x es el promedio de todos los valores de x y cuya coordenada y el de todos los valores de y , pertenece a la recta de ajuste. ¿Ocurre ésto en todos los casos?

c) La ocurrencia, debida al azar, de tres desviaciones consecutivas del mismo signo, permite pensar que tal vez una curva ajuste mejor estos datos. Probar con un ajuste cuadrático y calcular las sumas de las desviaciones en los dos casos.

6.4.12 Si representásemos los datos de la siguiente tabla en un papel semi-logarítmico, encontraríamos que los puntos están casi alineados.

x		77	100	185	239	285
y		2.4	3.4	7.0	11.1	19.6

Esto sugiere una relación del tipo $y = ae^{bx}$. Determinar las constantes a y b que mejor ajuste los valores por mínimos cuadrados. Utilizar la relación $\ln y = \ln a + bx$.

6.4.13 En $[a, b]$ se considera una partición uniforme Δ dada por $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$; $h = (b - a)/n$. Respecto del producto interno,

$$\int_a^b f(x)g(x)dx,$$

calcule la matriz de Gram de la base usual del espacio $M_0^1(\Delta)$ (cf. sección 2.4). Haga a continuación el caso no uniforme.

6.4.14 En la situación del ejercicio anterior, con $a = 0$, $b = 1$, encuentre la mejor aproximación a e^x por elementos de $M_0(\Delta)$, $\Delta = \{0, 1/2, 1\}$. Calcule la distancia a e^x de la mejor aproximación hallada. ¿Cuál es la distancia a e^x de su interpolante en $M_0^1(\Delta)$?

6.4.15 Pruebe que si A es una matriz real $m \times n$, la matriz $A^T A$ es una matriz real $n \times n$, simétrica y semidefinida positiva. Pruebe, utilizando sólo álgebra lineal, que $A^T A$ es regular (equivale a decir definida positiva) si y sólo si las columnas de A son linealmente independientes. Pruebe, utilizando sólo álgebra lineal, que todo sistema de la forma $A^T A x = A^T b$ es compatible. Estos resultados permiten discutir la existencia y unicidad de la solución del sistema (6.5) sin usar teoría de la aproximación.

6.4.16 Cociente de Rayleigh. Sea A una matriz $m \times m$ y $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ un vector de \mathbb{R}^m que aproxima un autovector de A . Para aproximar el correspondiente autovalor λ , se resuelve por mínimos cuadrados el sistema de m ecuaciones en una incógnita $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$. Pruebe que la solución es el cociente de Rayleigh $\mathbf{x}^T A\mathbf{x}/(\mathbf{x}^T \mathbf{x})$.

6.4.17 Determinar el desarrollo en serie de Fourier de la función periódica definida en un período por

$$f(t) = \begin{cases} 0 & -\pi < t < 0 \\ \sin t & 0 < t < \pi \end{cases}$$

Demostrar como aplicación que

$$\frac{1}{1 \cdot 3} - \frac{1}{3 \cdot 5} + \frac{1}{5 \cdot 7} - \frac{1}{7 \cdot 9} + \dots = \frac{\pi - 2}{4}$$

6.4.18 Determinar el desarrollo en serie de Fourier de la función periódica definida en un período por

$$f(t) = \begin{cases} 1 & 0 < t < \pi \\ -1 & \pi < t < 2\pi \end{cases}$$

6.4.19 Determinar el desarrollo en serie de Fourier de la función periódica definida en un período por

$$f(t) = \begin{cases} -t & -3 < t < 0 \\ t & 0 < t < 3 \end{cases}$$

6.4.20 Escribir el desarrollo de Fourier de la siguiente función. A continuación, escribir también un desarrollo en serie de senos solamente y otro en serie únicamente de cosenos

$$f(t) = t - t^2 \quad 0 < t < 1$$

6.4.21 Determinar el desarrollo en serie de Fourier de la función periódica definida en un período por

$$f(t) = \begin{cases} 0 & -\pi < t < 0 \\ t^2 & 0 < t < \pi \end{cases}$$

y como aplicación deducir las siguientes sumas de series

$$\begin{aligned} 1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{4^2} + \cdots &= \frac{\pi^2}{6} \\ 1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} - \frac{1}{4^2} + \cdots &= \frac{\pi^2}{12} \\ 1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \frac{1}{7^2} + \cdots &= \frac{\pi^2}{8} \end{aligned}$$

6.4.22 Determinar el desarrollo en serie de Fourier de las funciones periódicas definidas en un período por

a) $f(t) = \operatorname{sen} \frac{t}{2} \quad -\pi < t < \pi$

b) $f(t) = \cos t \quad -\frac{\pi}{2} < t < \frac{\pi}{2}$

c) $f(t) = \begin{cases} \cos t & -\pi < t < 0 \\ \operatorname{sen} t & 0 < t < \pi \end{cases}$

d) $f(t) = e^t \quad -1 < t < 1$

6.4.23 Determinar el desarrollo en serie de senos y de cosenos (por separado) de las funciones siguientes:

a) $f(t) = e^t \quad 0 < t < 1$

$$\text{b) } f(t) = \cos t \quad 0 < t < 2\pi$$

$$\text{c) } f(t) = \operatorname{sen} t \quad 0 < t < 2\pi$$

$$\text{d) } f(t) = \begin{cases} t^2 & 0 < t < 1 \\ 2-t & 1 < t < 2 \end{cases}$$

6.4.24 ¿Cuál es la amplitud del término resultante de frecuencia $\frac{n\pi}{p}$ en las series de Fourier de la función cuya definición en un período se indica a continuación? ¿Cuál es la fase de cada uno de estos términos con relación a $\cos \frac{n\pi t}{p}$? ¿Y con relación a $\operatorname{sen} \frac{n\pi t}{p}$?

$$f(t) = \begin{cases} 1 & 0 < t < 1 \\ -1 & 1 < t < 2 \\ 0 & 2 < t < 4 \end{cases}$$

6.4.25 Encontrar la forma compleja de la serie de Fourier correspondiente a la función cuya definición en un período es

$$f(t) = e^{-t} \quad -1 < t < 1$$

Comprobar a partir de dicha expresión que el desarrollo real es

$$\begin{aligned} f(t) = \sinh 1 & - 2 \sinh \left(\frac{\cos \pi t}{1 + \pi^2} - \frac{\cos 2\pi t}{1 + 4\pi^2} + \frac{\cos 3\pi t}{1 + 9\pi^2} - \dots \right) \\ & - 2\pi \sinh 1 \left(\frac{\sin \pi t}{1 + \pi^2} - \frac{2 \sin 2\pi t}{1 + 4\pi^2} + \frac{3 \sin 3\pi t}{1 + 9\pi^2} - \dots \right) \end{aligned}$$

teniendo en cuenta que $\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$.

¿Sirve aquí el algoritmo de la transformada rápida (FFT)?

6.4.26 Determinar la forma compleja de las series de Fourier de las funciones periódicas cuyas definiciones en un período son

$$\text{a) } f(t) = t \quad 0 < t < 1$$

$$\text{b) } f(t) = t \quad -1 < t < 1$$

$$\text{c) } f(t) = \sin \frac{t}{2} \quad -\pi < t < \pi$$

$$\text{d) } f(t) = \cos t \quad \frac{-\pi}{2} < t < \frac{\pi}{2}$$