APROXIMACIONES

Contenido

<u>*Bibliografía recomendada:*</u>

Métodos Numéricos con Matlab. J. Mathews, Fink, K. 2000. Prentice Hall, ISBN 84-8322-181-0

Problemas de Cálculo Numérico para ingenieros con aplicaciones Matlab. J.M. Sanchez y A. Souto. 2005. Mc Graw Hill, ISBN 84-481-2951-2.

Introducción a la Aproximación.

El problema de aproximación tiene múltiples aplicaciones en distintos problemas de ingeniería y de las ciencias aplicadas en general.
Suele presentarse la necesidad de aproximar datos conocidos, con el sólo propósito de que la representación de dichos datos se pueda hacer con recursos más simples de almacenar y de trabajar.
Pero también suele ser necesario aproximar soluciones de sistemas de ecuaciones algebraicos o diferenciales, aun cuando dichas soluciones se desconocen, aunque se tiene certeza de su existencia y unicidad.
Se presenta una introducción a distintos problemas de aproximación, recurriendo a conceptos unificadores, partiendo de problemas sencillos de geometría, y creciendo en nivel de abstracción y dificultad.
En general se puede sintetizar como concepto generalizado el empleo del método de mínimos cuadrados, y su condición de ortogonalidad, a efectos de lograr representaciones aproximadas de funciones discretas o continuas.

Proyección de Vectores.

Se discute a continuación el problema de proyección de vectores, como una aproximación de los mismos, en el plano y en el espacio.

Vectores en el Plano Bidimensional

Sea dato el vector $\vec{y} \in R^2$, como por ejemplo $\vec{y} = [3.2 ; \quad 6.8]$, y se busca el vector $\vec{p}$ "contenido" en la recta L que resulta la mejor aproximación del vector $\vec{y}$ sobre la recta L. La recta L, es un *subespacio* de R^2, y se define como el lugar geométrico que forman todos los vectores generados por el *vector base* $\overrightarrow{\varphi_1} = [1 ; \quad 2]$, multiplicado por distintos escalares. Así cualquier vector que pertenece a la recta L se puede escribir como $\vec{p} = a_1\, \overrightarrow{\varphi_1}$. La dimensión del subespacio (recta L) es uno, y el coeficiente a_1 pertenece a los números reales.

Es necesario establecer alguna forma de *medir la aproximación o cercanía* entre los vectores $\vec{y}$ y $\vec{p}$. Para ello se define el vector residuo, como la diferencia entre el vector dato $\vec{y}$, y cualquier aproximación $\vec{p}$ sobre la recta L. Es decir, se define el vector residuo $\vec{r}$ como

$$\vec{r} = \vec{y} - \vec{p}$$

o bien

$$\vec{r} = \vec{y} - a_1\, \overrightarrow{\varphi_1}$$

Como *medida de la aproximación* entre los vectores $\vec{y}$ y $\vec{p}$, se adopta el cuadrado del módulo del vector residuo $\vec{r}$, o cuadrado de la norma cuadrática del vector residuo, que se puede calcular algebraicamente como

$$Medida\ de\ la\ Aproximación: (\|\boldsymbol{r}\|_2)^2 = <\vec{r}\,, \vec{r}>$$

En la Figura 1a) se pueden observar distintas alternativas del vector aproximación $\vec{p}$, proyecciones del vector $\vec{y}$ sobre la recta L, indicadas con los segmentos punteados en rojo, y sus vectores residuos asociados. Por otra parte, en la Figura 1b), se presenta la mejor aproximación $\vec{p}$ y su vector residuo $\vec{r}$ asociado.

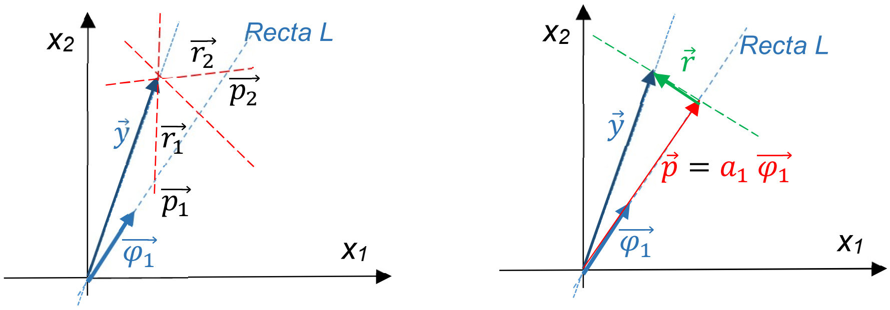


Figura 1. *a) Posibles aproximaciones* *b) La mejor aproximación*

De todos los posibles vectores $\vec{p}$ "contenidos" en la recta L, el que resulta la mejor aproximación es el que tiene asociado un vector residuo $\vec{r}$ que es perpendicular a la recta L, ya que la *medida de la aproximación* adoptada es la menor posible. O en otras palabras, de todos los valores posible que puede tomar a_1, el que se busca es aquel valor de a_1 que hace ortogonal al vector residuo $\vec{r}$ con el vector base $\overrightarrow{\varphi_1}$, ya que de ese modo la *medida de la aproximación* adoptada, es la menor posible. Las direcciones del vector residuo $\vec{r}$ y del vector base $\overrightarrow{\varphi_1}$ deben ser ortogonales entre sí.

Esta **condición de ortogonalidad** se pude expresar algebraicamente imponiendo que el producto escalar del *vector residuo* $\vec{r}$ y el *vector base* $\overrightarrow{\varphi_1}$ sea nulo:

$$< \vec{r}\, , \overrightarrow{\varphi_1} >= 0$$

De donde, al considerar la definición de $\vec{r}$ y de $\vec{p}$, se tiene que

$$< (\vec{y} - a_1\, \overrightarrow{\varphi_1}\,)\, , \overrightarrow{\varphi_1} >= 0$$

Como el producto escalar es distributivo respecto de la suma y la resta; es posible expresar la condición de ortogonalidad como

$$< \overrightarrow{\varphi_1}\, , \overrightarrow{\varphi_1} > \; a_1 \; = \; < (\vec{y}\; , \; \overrightarrow{\varphi_1} >$$

Para los datos planteados

dado por $\vec{y} = [3.2\, ; \quad 6.8]$, y $\overrightarrow{\varphi_1} = [1\, ; \quad 2]$, se tiene que

$$[1\, ; \quad 2]^T\, [1\, ; \quad 2] \;\; a_1 = [1\, ; \quad 2]^T\, [3.2\, ; \quad 6.8]$$

De donde se obtiene

$$a_1 = 3.36 = \left(\frac{1}{5}\right)(3.2 + 2 * 6.8) \; = \{\, [1\, ; \quad 2]^T\, [1\, ; \quad 2]\, \}^{-1} * [1\, ; \quad 2]^T\, [3.2\, ; \quad 6.8]$$

que resulta en

$$\vec{p} = a_1\, \overrightarrow{\varphi_1} = 3.36\, [1\, ; \quad 2] = [3.36; \quad 6.72]$$

Con un vector residuo $\vec{r} = \; \vec{y} - \vec{p}$, dado por

$$\vec{r} = \; \vec{y} - \vec{p} = [3.2\, ; \quad 6.8] - [3.36; \quad 6.72] = [-0.16; \;\; 0.08\,]$$

Su módulo al cuadrado, que es la medida de la aproximación, resulta

$$< \vec{r}\, , \vec{r} \; >= [-0.16; \;\; 0.08]^T \;\; [-0.16; \;\; 0.08] = ((-0.16)^2 + (0.08)^2) = 0.0256$$

Se verifica que al multiplicarse escalarmente un vector residuo $\vec{r}$ por el vector base $\overrightarrow{\varphi_1}$ que genera la recta L, resultan ortogonales, ya que

$$< \vec{r}\,, \overrightarrow{\varphi_1} >= [-0.16;\ \ 0.08]^T\ \ [1\,;\quad 2] = (-0.16 * 1 + 0.08 * 2) = 0$$

Este resultado obtenido mediante la observación puramente geométrica en el plano, se puede comprobar planteado que la *medida de la aproximación* adoptada entre los vectores $\vec{y}$ y $\vec{p}$, establecida por el cuadrado del módulo del vector residuo $\vec{r}$, tome un valor estacionario.

El cuadrado del módulo del vector residuo $\vec{r}$, es una función del coeficiente a_1, ya que conocidos los vectores $\vec{y}$ y $\overrightarrow{\varphi_1}$, se tiene la siguiente función cuadrática dependiente de la variable a_1

$$< \vec{r}\,, \vec{r} > = < (\vec{y}\, - a_1\, \overrightarrow{\varphi_1}), \qquad (\vec{y}\, - a_1\, \overrightarrow{\varphi_1}) >$$

$$< \vec{r}\,, \vec{r} > = < \vec{y}, \vec{y} > -2a_1 < \vec{y}, \overrightarrow{\varphi_1} > +a_1^2\ < \overrightarrow{\varphi_1}, \overrightarrow{\varphi_1} >$$

El valor estacionario de esta función cuadrática está dado cuando la derivada primera de la función respecto de la variable a_1 sea nula. Esto es:

$$0\ = -< \vec{y}, \overrightarrow{\varphi_1} > +a_1\ < \overrightarrow{\varphi_1}, \overrightarrow{\varphi_1} >$$

O bien,

$$0\ = < a_1\overrightarrow{\varphi_1} - \vec{y}, \overrightarrow{\varphi_1} > = - < \vec{r}, \overrightarrow{\varphi_1} >$$

que resulta justamente la condición de ortogonalidad observada y utilizada anteriormente.

Además, como el coeficiente $< \overrightarrow{\varphi_1}, \overrightarrow{\varphi_1} >$ es positivo siempre (derivada segunda de la función cuadrática respecto de a_1 dos veces), se trata de un valor mínimo de dicha función cuadrática. Es decir, que la condición de ortogonalidad, hace que la función cuadrática, cuadrado del módulo del vector residuo, toma un valor mínimo. En otras palabras, la condición de ortogonalidad, asegura que la medida de aproximación adoptada, tenga un valor mínimo. La medida de aproximación adoptada es el cuadrado del módulo del vector $\vec{r}$, que se calcula como la suma de los cuadrados de las componentes del vector $\vec{r}$.

Vectores en el Espacio Tridimensional

Mejor aproximación o Proyección sobre una Recta

Sea dato el vector $\vec{y} \in R^3$, dado por $\vec{y} = [2.3\,;\quad 4.5;\quad 7.3]$, se busca el vector $\vec{p}$ "contenido" en la recta L que resulte la mejor aproximación del vector $\vec{y}$ sobre la recta L. La recta L, es un *subespacio* de R^3, y se define como el lugar geométrico que forman todos los vectores generados por el vector $\overrightarrow{\varphi_1} = [1\,;\quad 2;\quad 3]$, multiplicado por distintos escalares. Así cualquier vector que pertenece a la recta L se puede escribir como $\vec{p} = a_1\, \overrightarrow{\varphi_1}$. La dimensión de subespacio (recta L) es uno, y el coeficiente a_1 pertenece a los números reales.

En este caso el vector residuo se define como

$$\vec{r} =\ \vec{y} - \vec{p} = \vec{y} - a_1\, \overrightarrow{\varphi_1} = \begin{Bmatrix} 2.3 \\ 4.5 \\ 7.3 \end{Bmatrix} - a_1 \begin{Bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{Bmatrix}$$

La condición de ortogonalidad es

$$< \overrightarrow{\varphi_1}\,, \vec{r} > = < \overrightarrow{\varphi_1}\,, \vec{y} > -a_1 < \overrightarrow{\varphi_1}\,, \overrightarrow{\varphi_1} > = 0$$

$$< \overrightarrow{\varphi_1}, \vec{y} > = a_1 < \overrightarrow{\varphi_1}, \overrightarrow{\varphi_1} >$$

$$\{1 \quad 2 \quad 3\}\begin{Bmatrix}2.3\\4.5\\7.3\end{Bmatrix} = a_1 \{1 \quad 2 \quad 3\}\begin{Bmatrix}1\\2\\3\end{Bmatrix}$$

que resulta en

$$a_1 = 2.3714 = \{1 \quad 2 \quad 3\}\begin{Bmatrix}2.3\\4.5\\7.3\end{Bmatrix} / \{1 \quad 2 \quad 3\}\begin{Bmatrix}1\\2\\3\end{Bmatrix}$$

La mejor aproximación es

$$\vec{p} = a_1 \overrightarrow{\varphi_1} = 2.3714 \begin{Bmatrix}1\\2\\3\end{Bmatrix}$$

El vector residuo es

$$\vec{r} = \vec{y} - a_1 \overrightarrow{\varphi_1} = \begin{Bmatrix}-0.071429\\-0.242857\\0.185714\end{Bmatrix}$$

cuyo modulo al cuadrado es

$$< \vec{r}, \vec{r} >= 0.098571$$

Y se verifique la ortogonalidad entre el residuo $\vec{r}$ y el vector base $\overrightarrow{\varphi_1}$ que genera a la recta L

$$< \vec{r}, \overrightarrow{\varphi_1} >= \{-0.071429 \quad -0.242857 \quad 0.185714\}\begin{Bmatrix}1\\2\\3\end{Bmatrix} = 0$$

Mejor aproximación o Proyección sobre un Plano

Sea dato el vector $\vec{y} \in R^3$, dado por $\vec{y} = [2.3 ; \quad 4.5; \quad 7.3]$, se busca el vector $\vec{p}$ "contenido" en un plano π que resulte la mejor aproximación o proyección del vector $\vec{y}$ sobre el plano π.

El plano π, es un *subespacio* de R^3, de dimensión 2, y cualquier vector contenido en dicho plano se puede expresar como la combinación lineal de la base $B_\pi = \{\overrightarrow{\varphi_1} ; \overrightarrow{\varphi_2}\}$, que contiene dos vectores linealmente independientes pertenecientes al plano π. A modo de ejemplo, se pude considerar que

$$\overrightarrow{\varphi_1} = \begin{Bmatrix}1\\2\\3\end{Bmatrix} \quad \text{y} \quad \overrightarrow{\varphi_2} = \begin{Bmatrix}1\\2.5\\4\end{Bmatrix}$$

El vector $\vec{p}$ mejor aproximación se define como

$$\vec{p} = a_1 \overrightarrow{\varphi_1} + a_2 \overrightarrow{\varphi_2}$$

o matricialmente,

$$\vec{p} = \Phi \vec{a} = [\overrightarrow{\varphi_1} \quad \overrightarrow{\varphi_2}] \begin{Bmatrix}a_1\\a_2\end{Bmatrix}$$

Análogamente a lo tratado anteriormente, como *medida de la aproximación* entre los vectores $\vec{y}$ y $\vec{p}$, se adopta el *cuadrado del módulo del vector residuo* $\vec{r}$, o cuadrado de la norma cuadrática del vector residuo, que se puede calcular algebraicamente como

$$Medida\ de\ la\ Aproximación: (\|\boldsymbol{r}\|_2)^2 =<\vec{r}\,,\vec{r}\,>$$

estando el vector residuo $\vec{r}$ definido como

$$\vec{r} = \vec{y} - \vec{p}$$

o bien

$$\vec{r} = \vec{y} - \Phi\,\vec{a}$$

Así resulta que el cuadrado del módulo del vector residuo es

$$<\vec{r}\,,\vec{r}\,>=<(\vec{y} - \Phi\,\vec{a})\,,(\vec{y} - \Phi\,\vec{a})>$$

Haciendo uso de la propiedad distributiva de producto escalar resulta en una función cuadrática en las variables a_1 y a_2, agrupadas en las componentes del vector $\vec{a}$, que se expresa de la siguiente forma

$$<\vec{r}\,,\vec{r}\,>=<\vec{y},\vec{y}> -2<\Phi\,\vec{a},\vec{y}> +<\Phi\,\vec{a}\,,\Phi\,\vec{a}>$$

Para el ejemplo en consideración,

$$<\vec{r}\,,\vec{r}\,>=<\vec{y},\vec{y}> -2<\begin{bmatrix}1 & 1\\ 2 & 2.5\\ 3 & 4\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}a_1\\ a_2\end{Bmatrix},\begin{Bmatrix}2.3\\ 4.5\\ 7.3\end{Bmatrix}> +<\begin{bmatrix}1 & 1\\ 2 & 2.5\\ 3 & 4\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}a_1\\ a_2\end{Bmatrix},\begin{bmatrix}1 & 1\\ 2 & 2.5\\ 3 & 4\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}a_1\\ a_2\end{Bmatrix}>$$

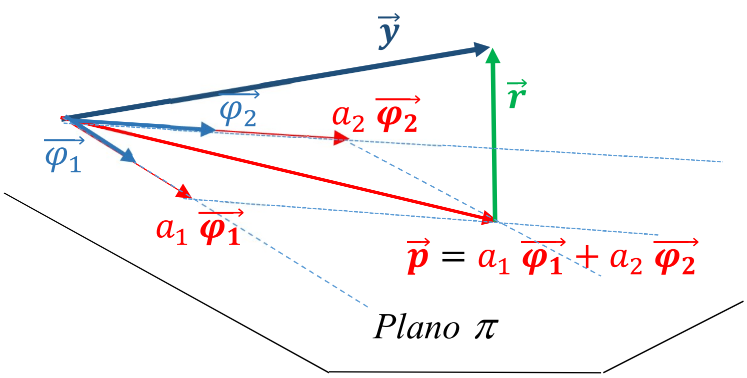
La condición de estacionario para esta función cuadrática es que las derivadas parciales de la función $<\vec{r}\,,\vec{r}\,>$ respecto de las variables a_1 y a_2 sean nulas. Esto es que el vector gradiente de $<\vec{r}\,,\vec{r}\,>$ sea igual al vector nulo, es decir:

$$\overrightarrow{\nabla<\vec{r}\,,\vec{r}\,>}=\begin{Bmatrix}\dfrac{\partial<\vec{r}\,,\vec{r}\,>}{\partial a_1}\\ \dfrac{\partial<\vec{r}\,,\vec{r}\,>}{\partial a_2}\end{Bmatrix}=\vec{0}$$

Que resulta en la siguiente **condición de ortogonalidad**

$$\Phi^T\,\vec{r} = \vec{0}$$

Por la cual el vector residuo r, debe ser ortogonal con cada elemento de la base $B_\pi = \{\overrightarrow{\varphi_1}\,;\overrightarrow{\varphi_2}\}$, que genera al plano π.



La condición de ortogonalidad se puede escribir en la siguiente forma:

$$\Phi^T\,\vec{\mathrm{r}} = \Phi^T\,\vec{\mathrm{y}} - \Phi^T\Phi\,\vec{\mathrm{a}} = \vec{0}$$

$$\Phi^T\,\Phi\,\vec{\mathrm{a}} = \Phi^T\,\vec{\mathrm{y}}$$

Para el ejemplo resulta

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2{,}5 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2.5 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2{,}5 & 4 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} 2.3 \\ 4.5 \\ 7.3 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 14 & 18 \\ 18 & 23.25 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 33.2 \\ 42.75 \end{Bmatrix}$$

Así, resulta

$$\begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1.6 \\ 0.6 \end{Bmatrix}$$

Y el vector mejor aproximación es

$$\vec{p} = \Phi\,\vec{\mathrm{a}} = [\overrightarrow{\varphi_1} \quad \overrightarrow{\varphi_2}]\begin{Bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2.5 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} 1.6 \\ 0.6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2.2 \\ 4.7 \\ 7.2 \end{Bmatrix}$$

El vector residuo es

$$\vec{r} = \vec{\mathrm{y}} - \Phi\,\vec{\mathrm{a}} = \begin{Bmatrix} 2.3 \\ 4.5 \\ 7.3 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} 2.2 \\ 4.7 \\ 7.2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.1 \\ -0.2 \\ 0.1 \end{Bmatrix}$$

Cuyo modulo al cuadrado es

$$< \vec{r}\,, \vec{r} > = 0.06$$

que es la medida adoptada para la aproximación.

Es oportuno destacar que:

Para otros vectores en la base $B_\pi = \{\overrightarrow{\varphi_1}\,;\overrightarrow{\varphi_2}\}$, habrá otro plano, y otra mejor aproximación o proyección sobre ese otro plano.

La matriz $\Phi^T\,\Phi$ es una matriz simétrica y definida positiva ya que sus componentes son todos los productos escalares de los vectores de base $B_\pi = \{\overrightarrow{\varphi_1}\,;\overrightarrow{\varphi_2}\}$,.

La matriz $\Phi^T\,\Phi$ en algunos textos se la denomina Matriz de Gram, y a sus elementos "grammianos" de los vectores de la base $B_\pi = \{\overrightarrow{\varphi_1}\,;\overrightarrow{\varphi_2}\}$.

El vector $\vec{p}$ mejor aproximación del vector $\vec{y}$ en la base $B_\pi = \{\overrightarrow{\varphi_1}\,;\,\overrightarrow{\varphi_2}\}$, pertenece a la imagen de la matriz Φ, y el vector residuo pertenece al núcleo de la matriz Φ.

Planteo General de Aproximación

Es posible generalizar los conceptos de aproximación, en base a trabajar en un espacio vectorial en el cual exista un producto interior que permita definir la denominada norma cuadrática, con la cual es posible medir la proximidad entre elementos de dicho espacio vectorial. Es oportuno citar que una norma de un espacio vectorial debe tener la característica de ser siempre es positiva; y solo nula si se aplica al elemento nulo del espacio vectorial. Los elementos del espacio vectorial podrán ser vectores o funciones. Así el planteo de aproximación se puede enunciar de la siguiente forma:

Dado $\boldsymbol{y} \in$ V, siendo V un espacio vectorial de dimensión "dim_V", en el cual existe un **producto interior** que nos permite definir la norma cuadrática de un elemento $\boldsymbol{f} \in$ V cualquiera en la forma

$$\|\boldsymbol{f}\|_2 = < \boldsymbol{f}, \boldsymbol{f} > = \sqrt[2]{\sum_{k=1}^{N} |f_k|^2}$$

Se adopta una base B de un subespacio π contenido en V ($\pi \subset V$), de dimensión finita N, menor a la dimensión de V, formada por N elementos linealmente independientes $\boldsymbol{\varphi_k}$ (con k=1 a N).

Se define la aproximación $\boldsymbol{p}$ como una combinación lineal de la base elegida $B_\pi = \{\boldsymbol{\varphi_1}, \boldsymbol{\varphi_2} \ldots \boldsymbol{\varphi_N}\}$ en la forma

$$\boldsymbol{p} = \sum_{k=1}^{N} a_k \, \boldsymbol{\varphi_k}$$

siendo los coeficientes a_k las N incógnitas a determinar.

Se define el residuo $\boldsymbol{r} \in$ V como la diferencia entre el elemento dado $\boldsymbol{y} \in$ V con la aproximación $\boldsymbol{p} \in \pi$ con $\pi \subset$ V. Así se tiene

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{p} = \boldsymbol{y} - \sum_{k=1}^{N} a_k \, \boldsymbol{\varphi_k}$$

Se adopta como *medida de la aproximación* a la **norma cuadrática** del residuo. Siendo su cuadrado el producto interior de $\boldsymbol{r}$ con $\boldsymbol{r}$

$$(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2 = < \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r} >$$

En base a la definición de residuo, se puede expresar que

$$(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2 = < \boldsymbol{r}, \boldsymbol{y} - \sum_{k=1}^{N} a_k \, \boldsymbol{\varphi_k} >$$

Haciendo uso de la propiedad distributiva del producto interior, resulta

$$(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2 = < \boldsymbol{r}, \boldsymbol{y} > - < \boldsymbol{r}, \sum_{k=1}^{N} a_k \, \boldsymbol{\varphi_k} >$$

En base a la definición de residuo, se tiene

$$(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2 = < (\boldsymbol{y} - \sum_{i=1}^{N} a_i \, \boldsymbol{\varphi_i}), \boldsymbol{y} > - < (\boldsymbol{y} - \sum_{i=1}^{N} a_i \, \boldsymbol{\varphi_i}), \sum_{k=1}^{N} a_k \, \boldsymbol{\varphi_k} >$$

Haciendo uso de la propiedad distributiva del producto interior, resulta

$$(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2 =< \boldsymbol{y}, \boldsymbol{y} > -< \sum_{i=1}^{N} a_i \, \boldsymbol{\varphi_i} , \boldsymbol{y} > \; -< \boldsymbol{y} , \sum_{k=1}^{N} a_k \, \boldsymbol{\varphi_k} > +< \sum_{i=1}^{N} a_i \, \boldsymbol{\varphi_i} , \sum_{k=1}^{N} a_k \, \boldsymbol{\varphi_k} >$$

Agrupando términos semejantes, y haciendo uso de la propiedad distributiva del producto interior, es posible expresar al cuadrado de la **norma cuadrática del residuo** $(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2$ como:

$$(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2 =< \boldsymbol{y}, \boldsymbol{y} > \boldsymbol{-2} \sum_{k=1}^{N} a_k < \boldsymbol{\varphi_k} , \boldsymbol{y} > \; + \sum_{i=1}^{N} a_i \; \sum_{k=1}^{N} a_k < \boldsymbol{\varphi_i}, \boldsymbol{\varphi_k} >$$

Así $(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2$ resulta que es una función cuadrática de las N variables a_k, ya que todos los productos interiores $< \boldsymbol{\varphi_k} , \boldsymbol{y} >$ y $< \boldsymbol{\varphi_i}, \boldsymbol{\varphi_k} >$ se pueden calcular y son conocidos.

Se determinan los coeficientes a_k haciendo que la *medida de la aproximación* $(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2$ sea mínima, para lo cual es necesario que sus derivadas parciales respecto de cada una de las variables a_k con k de 1 a N, deben anularse. Esto conduce a que:

$$\frac{\partial(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2}{\partial a_k} = \boldsymbol{2} \left\{ \sum_{i=1}^{N} a_i \; < \boldsymbol{\varphi_i}, \boldsymbol{\varphi_k} > - < \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\varphi_k} > \right\} = \boldsymbol{0}$$

que se puede escribir como la **condición de normalidad** entre $\boldsymbol{r}$ y cada elemento $\boldsymbol{\varphi_k}$ de la Base

$$0 =< \boldsymbol{\varphi_k}, \left(\boldsymbol{y} - \sum_{i=1}^{N} a_i \, \boldsymbol{\varphi_i} \right) > = < \boldsymbol{\varphi_k}, \boldsymbol{r} >$$

Las ecuaciones normales son un sistema de ecuaciones lineales de la forma

$$\begin{bmatrix} \cdots & \cdots & \cdots \\ < \boldsymbol{\varphi_{i-1}}, \boldsymbol{\varphi_i} > & < \boldsymbol{\varphi_i}, \boldsymbol{\varphi_i} > & < \boldsymbol{\varphi_i}, \boldsymbol{\varphi_{i+1}} > \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vdots \\ < \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\varphi_i} > \\ \vdots \end{Bmatrix}$$

A la matriz de coeficientes se la denomina matriz de Gram, que resulta simétrica y definida positiva, ya que sus elementos son todos los productos interiores posibles entre dos elementos de la base elegida, que son linealmente independientes entre sí.

Por lo tanto, la función *medida de la aproximación* $(\|\boldsymbol{r}\|_2)^2$ será un valor mínimo para los a_k solución del sistema de ecuaciones lineales.

Los coeficientes del término independiente son el producto interior del elemento $\underline{\boldsymbol{y} \in \mathrm{V}}$ dado, con cada elemento $\boldsymbol{\varphi_k}$ de la Base B elegida, que genera al subespacio $\underline{\pi \subset \mathrm{V}}$ donde se define la aproximación $\underline{\boldsymbol{p} \in \pi}$.

En síntesis

Dado un elemento "***y***" que pertenece al espacio vectorial V ($\boldsymbol{y} \in$ V,) se busca una aproximación "***p***", tal que sean cercanos entre sí.

- $\boldsymbol{y} \in$ V, teniendo V una dimensión determinada.
- Existe un **producto interior en V,** que se indica como <f, g>, para dos elementos f y g cualesquiera, pertenecientes al Espacio Vectorial V. Entre otras propiedades, el producto interior tiene la propiedad de distribución respecto de la suma o la resta.

- Se define la norma cuadrática de cualquier elemento f del espacio vectorial V, asociada al producto interior $\|f\|_2 = < f, f >^{1/2}$, con la cual es posible medir la aproximación.
- $\boldsymbol{p}$ pertenece a un subespacio π de V, de dimensión finita N, menor a la dimensión de V, donde se elige una base $B_\pi = \{\boldsymbol{\varphi_1}, \boldsymbol{\varphi_2} \ldots \boldsymbol{\varphi_N}\}$ y se expresa la aproximación en la forma

$$\boldsymbol{p} = \sum_{k=1}^{N} a_k\, \boldsymbol{\varphi_k}$$

- Los coeficientes de la combinación lineal, que define la aproximación $\boldsymbol{p}$ se obtienen resolviendo las **ecuaciones normales**

$$0 =< \boldsymbol{\varphi_k}, \left(\boldsymbol{y} - \sum_{i=1}^{N} a_i\, \boldsymbol{\varphi_i}\right) > = < \boldsymbol{\varphi_k}, \boldsymbol{r} >$$

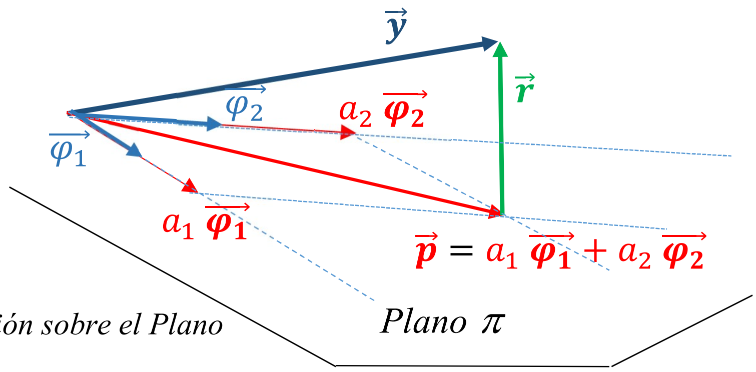


Figura 2. Proyección sobre el Plano

Ejemplo de Geometría en el Plano R2.

El espacio vectorial V es el plano Euclideano R^2, de modo que todos los vectores ($\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{\varphi_1}$) son de dimensión 2.

El subespacio π es de dimensión 1, y su base es el vector director de la recta denominado $\boldsymbol{\varphi_1}$

El vector $\boldsymbol{p}$ mejor aproximación que se obtiene, es el vector proyección ortogonal del vector dato $\boldsymbol{y}$ sobre la recta de dirección $\boldsymbol{\varphi_1}$.

Ejemplo de Geometría en el Espacio R3.

El espacio vectorial V es el espacio Euclideano R^3, de modo que todos los vectores ($\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{\varphi_1}$) son de dimensión 3. Hay dos ejemplos típicos: Proyección sobre una recta y Proyección sobre un plano.

Si el subespacio π es de dimensión 1, y su base es el vector director de la recta denominado $\boldsymbol{\varphi_1}$, el vector $\boldsymbol{p}$ mejor aproximación que se obtiene, es el vector proyección ortogonal del vector dato $\boldsymbol{y}$ sobre la recta de dirección $\boldsymbol{\varphi_1}$. Hay un único coeficiente a_1 a determinar.

Si el subespacio π es de dimensión 2, y su base es son los vectores $\{\boldsymbol{\varphi_1}, \boldsymbol{\varphi_2}\}$, el vector $\boldsymbol{p}$ mejor aproximación que se obtiene, es el vector proyección ortogonal del vector dato $\boldsymbol{y}$ sobre el plano generado por los vectores $\{\boldsymbol{\varphi_1}, \boldsymbol{\varphi_2}\}$. Hay dos coeficientes $\{a_1; a_2\}$ a determinar.

Aproximación de Funciones Discretas. Método de Mínimos Cuadrados

Son muchas las situaciones de interés en las que se tiene certeza de la existencia de una relación funcional entre dos variables (x, y=f(x)), y sólo se conocen algunos puntos de esa función. Tal es el caso de resultados de ensayos experimentales, de soluciones numéricas que generan una sucesión de valores convergentes, la digitalización de un proceso continuo o muestreo de una función determinada.

En la Figura 3 se puede apreciar el caso de una función y=f(x) de R → R dada en forma discreta; es decir, dada mediante (n+1) puntos (xi; yi=f(xi)) con i=0, n; representados por cruces en la Figura 3. En el caso de ser los puntos obtenidos a partir de ensayos (experimentales o numéricos) la función f(x) se representa en forma de línea punteada, mientras que cuando es una función determinada que ha sido muestreada, se representa a f(x) con línea continua.

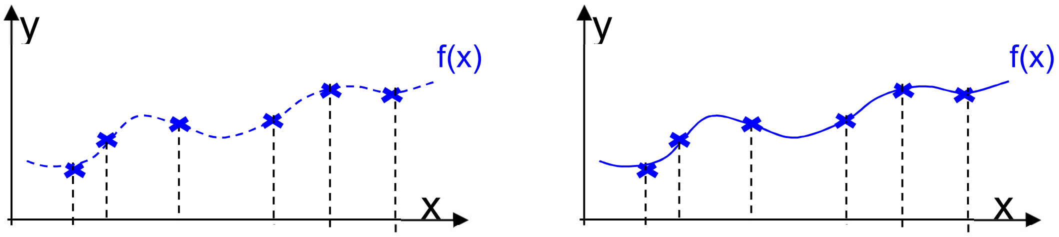


Figura 3. Datos experimentales
Datos muestreados

Se pretende encontrar una aproximación o representación continua, $P_m(x)$ de la función discreta f(x) dada por los n+1 puntos (xi; yi=f(xi)) con i=0, n; con particular interés en el intervalo de la variable independiente $x_0 \le x \le x_n$. Para ello, se propone que la función aproximación $\boldsymbol{P_m(x)}$ se escriba como una combinación lineal de funciones que forman una **base elegida** B_x, en el intervalo de interés. Si la base elegida es $B_x = \{\boldsymbol{\varphi_0(x)}, \boldsymbol{\varphi_1(x)}, \dots \dots \boldsymbol{\varphi_m(x)}\}$, entonces la aproximación se propone como

$$\boldsymbol{P_m(x)} = \sum_{k=0}^{M} a_k \, \boldsymbol{\varphi_k(x)}$$

Los coeficientes a_k con k=0 a M de la combinación lineal son las incógnitas a determinar. En general se considera que el número (M+1) de coeficientes a determinar, es mucho menor al número de puntos datos (n+1). En la Figura 4 se puede observar la aproximación $\boldsymbol{P_m(x)}$ en línea continua, mientras que la función f(x) está en línea de trazos.

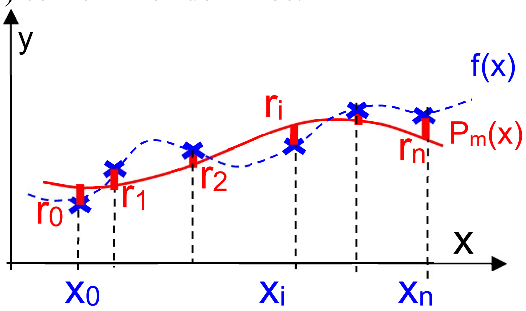


Figura 4. Aproximación Pm(x) de una función discreta (x_i; $y_i=f(x_i)$)

Para determinar los coeficientes de la combinación lineal se usará el **método de mínimos cuadrados** en una forma genérica, siguiendo los conceptos tratados en el punto Planteo General de Aproximación.

Entonces para cada abscisa x_i, correspondientes a un dato de la función discreta, es posible comparar el valor que tomará la aproximación $\boldsymbol{P_m(x_i)}$, con el valor dato de la función discreta $\boldsymbol{f(x_i)}$, y definir el valor del residuo en x_i como

$$\boldsymbol{r_i = f(x_i) - P_m(x_i) \qquad con\ i = 0\ a\ N}$$

o bien, al considerar la definición de la aproximación

$$\boldsymbol{r_i} = \boldsymbol{f(x_i)} - \sum_{k=0}^{M} a_k\, \boldsymbol{\varphi_k(x_i)} \qquad \boldsymbol{con\ i = 0\ a\ N}$$

El residuo es una forma particular de medir la desviación de la aproximación con la función discreta. Es posible considerar en cada $\boldsymbol{x_i}$, a los residuos, así como a las ordenadas de la función discreta dato, y a los valores de la aproximación, como componentes de vectores que pertenecen a $R^{(n+1)}$, espacio vectorial euclidiano de dimensión (n+1). Así se puede escribir en forma matricial al residuo en la forma

$$\vec{\boldsymbol{r}} = \vec{\boldsymbol{f}} - \overrightarrow{\boldsymbol{P_m}}$$

$$\vec{\boldsymbol{r}} = \vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\, \vec{\boldsymbol{a}}$$

$$\begin{Bmatrix} r_0 \\ r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ r_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ \vdots \\ f(x_n) \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_M(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_M(x_1) \\ \varphi_0(x_2) & \varphi_1(x_2) & \cdots & \varphi_M(x_2) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \cdots & \varphi_M(x_n) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_M \end{Bmatrix}$$

donde el vector $\vec{\boldsymbol{f}}$ tiene componentes $\boldsymbol{y_i = f(x_i)}$, y la matriz Φ tiene coeficientes $\Phi_{ik} = \boldsymbol{\varphi_k(x_i)}$ dados por cada función $\boldsymbol{\varphi_k(x)}$ (con k=0 a M)evaluada en cada abscisa dato $\boldsymbol{x_i}$**.** (con i=0 a n)

Así se tiene un vector $\vec{\boldsymbol{f}}$ perteneciente al espacio vectorial $R^{(N+1)}$, y se busca el vector aproximación $\overrightarrow{\boldsymbol{P_m}}$ que pertenece a $R^{(M+1)}$, subespacio de $R^{(N+1)}$. La aproximación $\overrightarrow{\boldsymbol{P_m}}$ es una combinación lineal de la base $\boldsymbol{B_v} = \{\vec{\boldsymbol{\varphi}}_\mathbf{0}, \vec{\boldsymbol{\varphi}}_\mathbf{1}, \vec{\boldsymbol{\varphi}}_\mathbf{2} \ldots \ldots \vec{\boldsymbol{\varphi}}_\boldsymbol{M}\}$**.**

Por tratarse el espacio vectorial $R^{(N+1)}$, de un espacio vectorial Euclidiano, el producto interior y la norma cuadrática para cualquier vector $\vec{\boldsymbol{v}}$ perteneciente al espacio vectorial $R^{(N+1)}$ se definen como

$$\|\vec{\boldsymbol{v}}\|_2 = <\vec{\boldsymbol{v}}\,, \vec{\boldsymbol{v}}, >^{1/2} = \sqrt[2]{\sum_{k=0}^{N} (v_k)^2}$$

De esta manera se cumplen las condiciones de la Aproximación General y es posible encontrar los coeficientes a_k de la combinación lineal imponiendo que el cuadrado de la norma cuadrática del vector residuo sea mínima, y así los coeficientes a_k serán la solución de las ecuaciones normales dadas por

$$0 = < \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{k}}, \left(\vec{\boldsymbol{f}} - \sum_{i=0}^{N} a_k \, \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{k}} \right) > = < \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{k}}, \boldsymbol{r} > \qquad \boldsymbol{con\ k = 1\ a\ M}$$

o bien en forma matricial

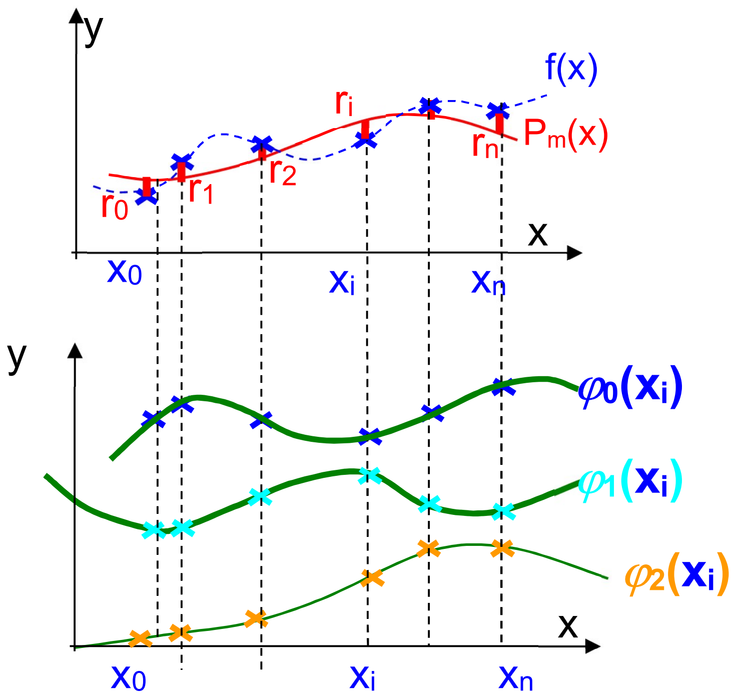
$$\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \vec{\boldsymbol{r}} = \ \boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ (\ \vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\,\vec{\boldsymbol{a}}\ ) = \vec{\mathbf{0}}$$

que al distribuir resulta en

$$\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \boldsymbol{\Phi}\ \ \vec{\boldsymbol{a}}\ \ = \ \boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \vec{\boldsymbol{f}}$$

Se asegura de esta manera que los coeficientes a_k, hacen mínima la norma cuadrática del vector residuo, o la suma del cuadrado de las componentes del vector residuo. Cada componente del vector residuo es la desviación entre los datos experimentales y la representación o aproximación obtenida.

Por lo tanto, la aproximación $\boldsymbol{P_m(x)}$ obtenida con el método de mínimos cuadrados tendrá una desviación “suavizada” o distribuida en todos los puntos datos, sin tener alguno de ellos como prioritario.



Ejemplo de Ensayos Experimentales Aproximados con una Recta

En laboratorio se ha medido los siguientes valores de un proceso, y se sabe (o se postula) que existe una relación lineal entre las variables medidas.

$$\boldsymbol{x} = [\ 0.5; \quad 1.5; \quad 2.5; \quad 3.5]$$

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = [\ 1.3; \quad 4.2 \quad 5.7 \quad 8.2\ ]$$

Se adopta como base de funciones linealmente independientes a los polinomios elementales con los que se puede generar cualquier recta en el plano; es decir

$$B_x = \{\ \boldsymbol{\varphi_0}(\boldsymbol{x})\ , \boldsymbol{\varphi_1}(\boldsymbol{x})\ \} = \{\ 1; \quad x\}$$

Así la aproximación que se propone es

$$P_1(x) = \ a_0\ 1 + \ a_1\ x$$

Al comparar en cada abscisa x_i, los valores que tomará la aproximación $\boldsymbol{P_1}(\boldsymbol{x_i})$**,** con el valor dato de la función discreta $\boldsymbol{y_i} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x_i})$**,** se definen los siguientes vectores

$$\vec{\boldsymbol{r}} \ = \ \vec{\boldsymbol{f}} - \overrightarrow{\boldsymbol{P_1}}$$

$$\vec{\boldsymbol{r}} \ = \ \vec{\boldsymbol{f}} - \ \boldsymbol{\Phi}\ \vec{\boldsymbol{a}}$$

$$\begin{Bmatrix} r_0 \\ r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1.3 \\ 4.2 \\ 5.7 \\ 8.2 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 1 & 1.5 \\ 1 & 2.5 \\ 1 & 3.5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix}$$

Se trata de vectores que pertenecen al espacio vectorial Euclideano de dimensión 4, denominado R^4, en el cual existe la norma cuadrática asociada al producto interior en la forma

$$\|\vec{\boldsymbol{v}}\|_2 = <\vec{\boldsymbol{v}}\,, \vec{\boldsymbol{v}}, >^{1/2} = \sqrt[2]{\sum_{k=1}^{4} (v_k)^2}$$

Siguiendo el planteo General de Aproximación la determinación de los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \ \ a_1\ ]$, se realiza aproximando el vector $\vec{\boldsymbol{f}} \in R^4$, en el subespacio de dimensión 2, generado por los vectores columnas de la matriz $\boldsymbol{\Phi}$**,** agrupados en la base $\boldsymbol{B_v} = \{\vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{0}}\,, \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{1}}\}$**.**

$$\vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{0}} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix}; \ \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{1}} = \begin{Bmatrix} 0.5 \\ 1.5 \\ 2.5 \\ 3.5 \end{Bmatrix} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 1 & 1.5 \\ 1 & 2.5 \\ 1 & 3.5 \end{bmatrix}$$

Los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \ \ a_1\ ]$, deben ser tales que cumplan con las siguientes ecuaciones normales

$$\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \vec{\boldsymbol{r}} = \ \boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ (\ \vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\,\vec{\boldsymbol{a}}\ \ ) = \vec{\boldsymbol{0}}$$

que en este caso resultan

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.5 & 1.5 & 2.5 & 3.5 \end{bmatrix} \left[\begin{Bmatrix} 1.3 \\ 4.2 \\ 5.7 \\ 8.2 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 1 & 1.5 \\ 1 & 2.5 \\ 1 & 3.5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} \right] = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

Al distribuir resulta en

$$\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \boldsymbol{\Phi}\ \vec{\boldsymbol{a}} = \boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \vec{\boldsymbol{f}}$$

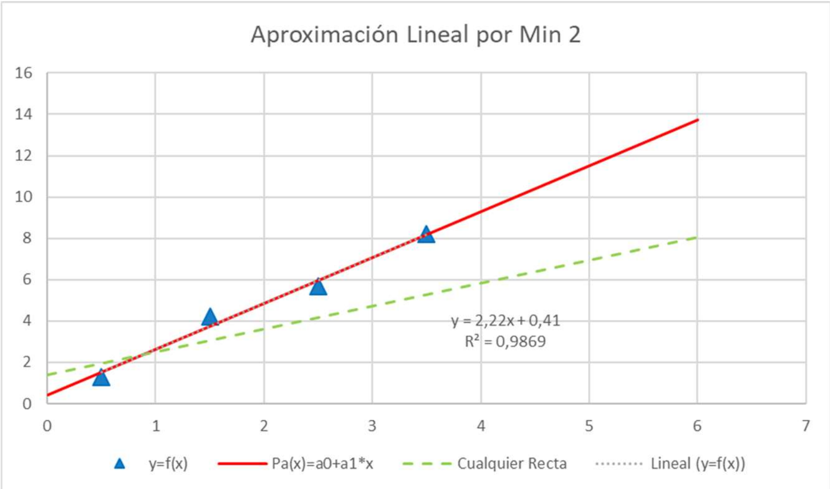
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.5 & 1.5 & 2.5 & 3.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 1 & 1.5 \\ 1 & 2.5 \\ 1 & 3.5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.5 & 1.5 & 2.5 & 3.5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 1.3 \\ 4.2 \\ 5.7 \\ 8.2 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 8 \\ 8 & 21 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 19.4 \\ 49.9 \end{Bmatrix}$$

Así los coeficientes solución son $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0;\ \ a_1\ ] = [0.41;\quad 2.22]$, y la función aproximación es

$$P_1(x) = a_0\ 1 + a_1\ x = 0.41\ 1 + 2.22\ x$$

En la Figura se presentan los datos y los resultados obtenidos



A los efectos de valorar la calidad de la aproximación se pueden considerar dos conceptos complementarios entre sí, que se presentan a continuación

Módulo del residuo: está garantizado que es el menor módulo para la base elegida, ya que se resolvieron las ecuaciones normales. Dado que el modulo es siempre mayor o igual acero, y que la matriz $\boldsymbol{\Phi}$ es definida positiva, las ecuaciones normales definen coeficientes que aseguran un valor mínimo. Lo ideal sería tener un valor nulo, que implicaría que el vector residuo sea el vector nulo. No se tendría una aproximación, sino un cambio de base del vector de datos $\vec{\boldsymbol{f}}$ en la base del espacio columnas de la matriz $\boldsymbol{\Phi}$.

La alternativa es que el modulo del vector residuo sea muy pequeño comparado con el módulo de la función discreta dato. Para el ejemplo en consideración, se tienen los siguientes valores:

$$\vec{\boldsymbol{r}} = \vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\ \vec{\boldsymbol{a}}$$

$$\begin{Bmatrix} r_0 \\ r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1.3 \\ 4.2 \\ 5.7 \\ 8.2 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 1 & 1.5 \\ 1 & 2.5 \\ 1 & 3.5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 0.41 \\ 2.22 \end{Bmatrix}$$

Lo que resulta

Funciones discretas	$\vec{\boldsymbol{r}}$	$\vec{\boldsymbol{f}}$	$\overrightarrow{\boldsymbol{P_m}} = \boldsymbol{\Phi}\ \vec{\boldsymbol{a}}$
Valores	$\begin{Bmatrix} -0.22 \\ 0.46 \\ -0.26 \\ 0.02 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} 1.3 \\ 4.2 \\ 5.7 \\ 8.2 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} 1.52 \\ 3.74 \\ 5.96 \\ 8.18 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 1 & 1.5 \\ 1 & 2.5 \\ 1 & 3.5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 0.41 \\ 2.22 \end{Bmatrix}$
Norma 2 de un vector $\lVert\vec{\boldsymbol{v}}\rVert_2 = <\vec{\boldsymbol{v}}, \vec{\boldsymbol{v}}, >^{1/2}$	0.5727	10.911	10.896
Promedio de Componentes	-1.72 E-15	$fp = 4.85$	$Pp = 4.85$

Al comparar $\lVert\vec{\boldsymbol{r}}\rVert_2$= 0.5727 con $\lVert\vec{\boldsymbol{f}}\rVert_2$= 10.91, se tiene un coeficiente de "error relativo"

$$\lVert\vec{\boldsymbol{r}}\rVert_2 / \lVert\vec{\boldsymbol{f}}\rVert_2 = 0.5727 / 10.911 = 0.0525 = 5.25\%$$

que según sea la aplicación o problema a resolver, se puede considerar un indicador aceptable.

Coeficiente de Correlación de Pearson: En base a el análisis de datos de Estadística, este coeficiente cuando vale uno las variables que intervienen en su cálculo tienen una correlación perfecta. El Coeficiente de Correlación de Pearson se define

$$r = \frac{< \overrightarrow{\boldsymbol{f} - \boldsymbol{fp}},\ \overrightarrow{\boldsymbol{P_m} - \boldsymbol{Pp}} >}{\lVert\overrightarrow{\boldsymbol{f} - \boldsymbol{fp}}\rVert_2\ \lVert\overrightarrow{\boldsymbol{P_m} - \boldsymbol{Pp}}\rVert_2}$$

Siendo fp y Pp los valores promedios de las funciones discretas (o vectores) $\vec{\boldsymbol{f}}$ (función discreta dato) y $\overrightarrow{\boldsymbol{P_m}}$, (función discreta aproximación obtenida), respectivamente. Se puede interpretar al coeficiente r como el coseno del ángulo que forman entre sí los vectores $\overrightarrow{\boldsymbol{f} - \boldsymbol{fp}}$ y $\overrightarrow{\boldsymbol{P_m} - \boldsymbol{Pp}}$**.** Para el ejemplo resulta:

Vectores o Funciones discretas	$\overrightarrow{\boldsymbol{f} - \boldsymbol{fp}}$	$\overrightarrow{\boldsymbol{P_m} - \boldsymbol{Pp}}$
Valores	$\begin{Bmatrix} -3.55 \\ -0.65 \\ +0.85 \\ +3.35 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} -3.33 \\ -1.11 \\ +1.11 \\ +3.33 \end{Bmatrix}$
Norma 2 de un vector $\lVert\vec{\boldsymbol{v}}\rVert_2 = <\vec{\boldsymbol{v}}, \vec{\boldsymbol{v}}, >^{1/2}$	4.997	4.964

El Coeficiente de Correlación de Pearson r es:

$$r = \frac{\{-3.55 \quad -0.65 \quad +0.85 \quad +3.35\}\begin{Bmatrix} -3.33 \\ -1.11 \\ +1.11 \\ +3.33 \end{Bmatrix}}{4.997 \quad 4.964} = 0.9934$$

El caso de correlación ideal es que el r valga 1, de modo que la aproximación obtenida es aceptable según el criterio de correlación de Pearson. Suele usarse el cuadrado del Coeficiente de Pearson, que en este case es $r^2 = 0.9934^2 = 0.9868$

Ejemplo Convergencia en Integración Numérica

Sea la función $\boldsymbol{y = sen(\pi\, t)}$ en el rango de la variable independiente $\boldsymbol{t\ \varepsilon\ [0; 0,5]}$, para la cual se sabe que el valor exacto de la integral definida es

$$\boldsymbol{I_{ex} = \int_0^{0.5} sen(\pi\, t)dt = 1/\pi \cong 0.3183}$$

Valores aproximados de la integral definida se pueden calcular usando integración numérica. En todos los casos, se divide el rango de integración [0; 0,5] en N intervalos iguales y se obtiene la función discreta dada por los N+1 puntos $(\boldsymbol{t_k; sen(\pi\, t_k)})$ con los que se aplican los algoritmos de integración numérica; tales como, las sumas de Riemann (In e IM) o Trapecios múltiple (ITrap). En la siguiente Tabla se presentan resultados para los distintos algoritmos y distintas discretizaciones (N o Δt)

N	Δt	Im(N)	IM(N)	ITrap(N)
5	0,1	0,2656876	0,36568758	0,31568758
10	0,05	0,2926551	0,34265512	0,31765512
20	0,025	0,3056462	0,33064624	0,31814624
40	0,0125	0,312019	0,32451898	0,31826898
80	0,00625	0,31517	0,32142	0,3183

Es posible obtener el valor de convergencia para cada algoritmo haciendo uso del método de mínimos cuadrados.

Convergencia de Im(N)

Dado que se sabe que el error del algoritmo de la Sumas de Riemann es de la forma $Er = C_{Im} \cdot \Delta t$, siendo $\Delta t = 0{,}5/N$, se busca la siguiente aproximación por mínimos cuadrados para la Suma de Riemann Im(N)

$$Im_1(N) = a_0\, 1 + a_1 \frac{1}{N}$$

con la siguiente Base $B = \{\varphi_0;\ \varphi_1(N)\} = \{1,\ \frac{1}{N}\}$.

Como función discreta Im(N) se consideran los siguientes resultados

N	$\vec{f}$ =Im(N)
5	0,2656876
10	0,2926551
20	0,3056462

Siguiendo el planteo General de Aproximación la determinación de los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0;\ \ a_1\ ]$, se realiza aproximando el vector $\vec{\boldsymbol{f}} \in R^3$, en el subespacio de dimensión 2, generado por los vectores columnas de la matriz **$\boldsymbol{\Phi}$,** agrupados en la base $\boldsymbol{B_v} = \{\vec{\boldsymbol{\varphi}}_0, \vec{\boldsymbol{\varphi}}_1\}$.

$$\vec{\boldsymbol{\varphi}}_0 = \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix};\ \vec{\boldsymbol{\varphi}}_1 = \begin{Bmatrix} 1/5 \\ 1/10 \\ 1/20 \end{Bmatrix} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} 1 & 1/5 \\ 1 & 1/10 \\ 1 & 1/20 \end{bmatrix}$$

Los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0;\ \ a_1\ ]$, deben ser tales que cumplan con las siguientes ecuaciones normales

$$\boldsymbol{\Phi^T}\ \vec{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{\Phi^T}\left(\ \vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\,\vec{\boldsymbol{a}}\ \right) = \vec{\boldsymbol{0}}$$

que en este caso resultan

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1/5 & 1/10 & 1/20 \end{bmatrix}\left[\begin{Bmatrix} 0{,}2656876 \\ 0{,}2926551 \\ 0{,}3056462 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 1/5 \\ 1 & 1/10 \\ 1 & 1/20 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix}\right] = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

Al distribuir resulta en

$$\boldsymbol{\Phi^T}\ \boldsymbol{\Phi}\ \ \vec{\boldsymbol{a}}\ \ = \ \boldsymbol{\Phi^T}\ \vec{\boldsymbol{f}}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1/5 & 1/10 & 1/20 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1/5 \\ 1 & 1/10 \\ 1 & 1/20 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1/5 & 1/10 & 1/20 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} 0{,}2656876 \\ 0{,}2926551 \\ 0{,}3056462 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 0{,}35 \\ 0{,}35 & 0{,}0525 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0{,}863989 \\ 0{,}097685 \end{Bmatrix}$$

Así los coeficientes solución son $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0;\ \ a_1\ ] = [0.31913;\quad -0{,}26686]$, y la función aproximación es

$$Im_1(N) = \ a_0\, 1 + \ a_1 \frac{1}{N} = \ \ 0.31913\ 1 + (-0{,}26686)\ \frac{1}{N}$$

Así resulta que el valor de convergencia es

$$Ic_{Im_1} = \lim_{N\to\infty} Im_1(N) = 0.31913$$

De comparar Ic_{Im1} con el valor exacto de la integral $Iex = 1/\pi$ resulta que

$$Ic_{Im1} = 0{,}26\%\ Iex$$

El valor de convergencia obtenido es muy cercano al valor exacto.

Repetir la aproximación, pero considerando la siguiente función discreta

N	$\vec{\boldsymbol{f}}$ =Im(N)
5	0,2656876
10	0,2926551
20	0,3056462
40	0,312019
80	0,31517

Obtener nuevamente el valor de convergencia y compararlo con el valor exacto.

Convergencia de ITrap(N)

Dado que se sabe que el error del algoritmo de Trapecios Múltiple es de la forma $Er = C_{Im} \cdot \Delta t^2$, siendo $\Delta t = 0{,}5/N$, se busca la siguiente aproximación por mínimos cuadrados para la integración de Trapecios Múltiple ITrap(N)

$$ITrap_1(N) = a_0\, 1 + a_1 \frac{1}{N^2}$$

con la siguiente Base $B = \{\varphi_0;\ \varphi_1(N)\} = \{\, 1,\ \frac{1}{N^2}\}$.

Como función discreta ITrap(N) se consideran los siguientes resultados

N	$\vec{f}$ =ITrap(N)
5	0,31568758
10	0,31765512
20	0,31814624

Comprobar que el valor de convergencia es

$$Ic_{ITrap_1} = \lim_{N\to\infty} ITrap_1(N) = 0.31831$$

Que comparado con el valor exacto de la integral $Iex = 1/\pi$ resulta ser

$$Ic_{ITrap_1} = 1{,}8E - 06\; Iex$$

Repetir la aproximación, pero considerando la siguiente función discreta

N	$\vec{f}$ =ITrap(N)
5	0,31568758
10	0,31765512
20	0,31814624
40	0,31826898
80	0,3183

Obtener nuevamente el valor de convergencia y compararlo con el valor exacto.

Convergencia de IM(Δt)

Dado que se sabe que el error del algoritmo de la Sumas de Riemann es de la forma $Er = C_{Im} \cdot \Delta t$, se busca la siguiente aproximación por mínimos cuadrados

$$IM_1(\Delta t) = a_0\, 1 + a_1\, \Delta t$$

con la siguiente Base $B = \{\varphi_0;\ \varphi_1(\Delta t)\} = \{\, 1,\ \Delta t\}$, y tomando como función discreta IM(Δt) a los siguientes resultados

Δt	$\vec{f}$ =IM(Δt)
0,1	0,36568758
0,05	0,34265512
0,025	0,33064624

Siguiendo el planteo General de Aproximación la determinación de los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \;\; a_1 \,]$, se realiza aproximando el vector $\vec{\boldsymbol{f}} \in R^3$, en el subespacio de dimensión 2, generado por los vectores columnas de la matriz $\boldsymbol{\Phi}$**,** agrupados en la base $\boldsymbol{B_v} = \{\, \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{0}} \,, \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{1}}\}$**.**

$$\vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{0}} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix}; \;\; \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{1}} = \begin{Bmatrix} 0{,}1 \\ 0{,}05 \\ 0{,}025 \end{Bmatrix} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} 1 & 0{,}1 \\ 1 & 0{,}05 \\ 1 & 0{,}025 \end{bmatrix}$$

Los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \;\; a_1 \,]$, deben ser tales que cumplan con las siguientes ecuaciones normales

$$\boldsymbol{\Phi^T} \; \vec{\boldsymbol{r}} = \; \boldsymbol{\Phi^T} \left(\; \vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi} \, \vec{\boldsymbol{a}} \; \right) = \vec{\mathbf{0}}$$

que en este caso resultan

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0{,}1 & 0{,}05 & 0{,}025 \end{bmatrix} \left[\begin{Bmatrix} 0{,}36568758 \\ 0{,}34265512 \\ 0{,}33064624 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0{,}1 \\ 1 & 0{,}05 \\ 1 & 0{,}025 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} \right] = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

Al distribuir resulta en

$$\boldsymbol{\Phi^T} \, \boldsymbol{\Phi} \;\; \vec{\boldsymbol{a}} \;\; = \; \boldsymbol{\Phi^T} \; \vec{\boldsymbol{f}}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1/5 & 1/10 & 1/20 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1/5 \\ 1 & 1/10 \\ 1 & 1/20 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1/5 & 1/10 & 1/20 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 0{,}36568758 \\ 0{,}34265512 \\ 0{,}33064624 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 0{,}175 \\ 0{,}175 & 0{,}01313 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 1{,}03899 \\ 0{,}06197 \end{Bmatrix}$$

Así los coeficientes solución son $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \;\; a_1 \,] = [0.31913; \;\; 0{,}46628]$, y la función aproximación es

$$IM_1(\Delta t) = \; a_0 \; 1 + \; a_1 \;\; \Delta t = \;\; 0.31913 \; 1 + (0.46628) \; \Delta t$$

Así resulta que el valor de convergencia es

$$Ic_{IM_1} = \lim_{\Delta t \to 0} IM_1(N) = 0.31913$$

De comparar Ic_{IM1} con el valor exacto de la integral $Iex = 1/\pi$ resulta que

$$Ic_{IM} \;\; = 0{,}26\% \; Iex$$

El valor de convergencia obtenido es muy cercano al valor exacto.

Repetir la aproximación, pero considerando la siguiente función discreta

Δt	$\vec{f}$ =IM(Δt)
0,1	0,36568758
0,05	0,34265512
0,025	0,33064624
0,0125	0,32451898
0,00625	0,32142

Obtener nuevamente el valor de convergencia y compararlo con el valor exacto.

Convergencia de ITrap(Δt)

Dado que se sabe que el error del algoritmo de Trapecios Múltiple es de la forma $Er = C_T \cdot \Delta t^2$, se busca la siguiente aproximación por mínimos cuadrados

$$ITrap_1(\Delta t) = \, a_0 \, 1 + \, a_1 \, \Delta t^2$$

con la siguiente Base $B = \{\varphi_0; \;\; \varphi_1(\Delta t)\} = \{\, 1, \;\; \Delta t^2\}$, y tomando como función discreta ITrap(Δt) a los siguientes resultados

Δt	$\vec{f}$ =ITrap(Δt)
0,1	0,31568758
0,05	0,31765512
0,025	0,31814624

Comprobar que el valor de convergencia es

$$Ic_{ITrap_1} = \lim_{\Delta t \to 0} ITrap_1(\Delta t) = 0.31831$$

Que comparado con el valor exacto de la integral $Iex = 1/\pi$ resulta ser

$$Ic_{ITrap_1} = 1{,}8E - 06 \; Iex$$

Repetir tomando como función discreta ITrap(Δt) a los siguientes resultados para la función discreta

Δt	$\vec{f}$ =ITrap(Δt)
0,1	0,31568758
0,05	0,31765512
0,025	0,31814624
0,0125	0,31826898
0,00625	0,3183

Y comprobar que $Ic_{ITrap_1} = 1{,}14E - 06 \; Iex$

Ejemplo de Aproximación con una función Potencial, para definir Orden de Error

Para obtener una aproximación de la derivada de una función en una abscisa determinada, es posible recurrir a distintas reglas de derivadas numéricas; tales como, derivadas adelante o derivadas centrales.

Sea la función $f(x) = seno(x)$ cuya derivada primera es la función $cos(x)$. Se aproxima la derivada primera de $f(x) = seno(x)$ en $x = \pi/10$, con reglas de derivada numérica para distintos valores de Δx y se calculan los errores de dichas aproximaciones con respecto a la solución exacta.

Así cuando se usa la derivada primera adelante (considerando 2 puntos) se tienen los siguientes valores para los distintos Δx

Δx	$f_s' = (-f_s + f_{s+1})/\Delta x$	$f_{ex}' = \cos(\pi/10)$	Er=abs(f_s'- f_{ex}')
0,1	0,934034236	0,951056516	0,01702228
0,01	0,949495593	0,951056516	0,001560923
0,001	0,950901849	0,951056516	0,000154667

El Error, definido como la diferencia entre el valor aproximado y el valor exacto de la derivada, en general se puede expresar en la forma

$$Er\ (\Delta x) = C\ \Delta x^{p}$$

donde C y p dependen de la regla de derivación que se trate. Si bien es posible encontrar la expresión del error recurriendo a Serie de Taylor; también es posible obtener el orden p del error mediante el uso de una aproximación por mínimos cuadrados.

Para aplicar el método de mínimos cuadrados es conveniente hacerlo luego de aplicar logaritmos a la forma exponencial propuesta. Así resulta

$$\log\big(Error\ (\Delta x)\big) = \log(C) + p\ \ \log(\Delta x)$$

que es una aproximación lineal de los logaritmos naturales de los datos discretos. Es decir:

$$\mathrm{y} = a_0 + a_1\ \ \mathrm{x}$$

con lo cual las equivalencias son:

$$\mathrm{y} = \log\big(Error\ (\Delta x)\big) \qquad x = \log(\Delta x) \qquad a_0 = \log(C) \qquad a_1 = p$$

Entonces se aplica logaritmos decimales de los datos discretos, y resulta

x = log(Δx)	y = log(Er)	y = log(Er)
-1	log(0,01702228)	-1,768982267
-2	log(0,001560923)	-2,806618532
-3	log(0,000154667)	-3,810602356

Para la aproximación lineal entre x e y, la base de funciones es B={1, x}, de modo que resulta

$$\vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{0}} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix};\ \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{1}} = \begin{Bmatrix} -1 \\ -2 \\ -3 \end{Bmatrix} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -2 \\ 1 & -3 \end{bmatrix}$$

Los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0;\ \ a_1\ ]$, deben ser tales que cumplan con las siguientes ecuaciones normales

$$\boldsymbol{\Phi^T\ \Phi}\ \ \vec{\boldsymbol{a}}\ \ = \ \boldsymbol{\Phi^T}\ \vec{\boldsymbol{f}}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & -2 & -3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -2 \\ 1 & -3 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & -2 & -3 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} -1{,}768982267 \\ -2{,}806618532 \\ -3{,}810602356 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & -6 \\ -6 & 14 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -8{,}386 \\ 18{,}814 \end{Bmatrix}$$

Así los coeficientes solución son $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0;\ \ a_1\ ] = [-0{,}7537;\ \ \ 1{,}0208]$, y la función aproximación es

$$\mathrm{y} = \quad a_0\, 1 +\ a_1\, \mathrm{x} = \log(C) + p\ \ \log(\Delta x)\ \ =\ \ 10^{(-0{,}7537)} \quad 1\ + 1{,}0208\ \log(\Delta x)$$

que es posible expresar como

$$Er\ (\Delta x) = C\ \Delta x^{p}\ = 10^{(-0{,}7537)}\ \Delta x^{1{,}0208}$$

Usando Serie de Taylor se demuestra que el orden del error es 1.

Cuando se usa la derivada primera central (considerando 3 puntos) se tienen los siguientes valores para los distintos Δx

Δx	$f_s' = (-f_{s-1} + f_{s+1})/(2\Delta x)$	$f_{ex}' = \cos(\pi/10)$	Er=abs(f_s'- f_{ex}')
0,1	0,94947221445975	0,951056516	1,5843018354037 E-03
0,01	0,95104066543247	0,951056516	1,58508626830756 E-05
0,001	0,951056357785751	0,951056516	1,5850940238149 E-07

El Error, definido como la diferencia entre el valor aproximado y el valor exacto de la derivada, en general se puede expresar en la forma

$$Er\ (\Delta x) = C\ \Delta x^p$$

Para aplicar el método de mínimos cuadrados es conveniente hacerlo luego de aplicar logaritmos a la forma exponencial propuesta. Así resulta

$$\log\big(Error\ (\Delta x)\big) = \log(C) + p\ \log(\Delta x)$$

que es una aproximación lineal de los logaritmos naturales de los datos discretos. Es decir:

$$\mathrm{y} = a_0 + a_1\ \ \mathrm{x}$$

con lo cual las equivalencias son:

$$\mathrm{y} = \log\big(Error\ (\Delta x)\big) \qquad x = \log(\Delta x) \qquad a_0 = \log(C) \quad a_1 = p$$

Entonces se aplica logaritmos decimales de los datos discretos, y resulta

x = log(Δx)	y = log(Er)	y = log(Er)
-1	log(1,5843018354037 E-03)	-2,800162075
-2	log(1,58508626830756 E-05)	-4,799947096
-3	log(1,5850940238149 E-07)	-6,799944971

Para la aproximación lineal entre x e y, la base de funciones es B={1, x}, de modo que resulta

$$\vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{0}} = \begin{Bmatrix}1\\1\\1\end{Bmatrix};\ \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{1}} = \begin{Bmatrix}-1\\-2\\-3\end{Bmatrix} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix}1 & -1\\1 & -2\\1 & -3\end{bmatrix}$$

Los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0;\ \ a_1\ ]$, deben ser tales que cumplan con las siguientes ecuaciones normales

$$\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \boldsymbol{\Phi}\ \ \vec{\boldsymbol{a}}\ \ = \boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \vec{\boldsymbol{f}}$$

$$\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\-1 & -2 & -3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -1\\1 & -2\\1 & -3\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}a_0\\a_1\end{Bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\-1 & -2 & -3\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}-2{,}800162075\\-4{,}799947096\\-6{,}799944971\end{Bmatrix}$$

Así los coeficientes solución son $\vec{\boldsymbol{a}}$ = $[a_0;\ \ a_1\ ]$ = [−0,8;   1,99989], y la función aproximación es

$$\mathrm{y} = \quad a_0\, 1 +\ a_1\, \mathrm{x} = \log(C) + p\ \log(\Delta x)\ \ =\ 10^{(-0,8)}\quad 1\ + 1{,}99989\ \log(\Delta x)$$

que es posible expresar como

$$Er\ (\Delta x) = C\ \Delta x^p\ = 10^{(-8)}\ \Delta x^{1,99989}$$

Usando Serie de Taylor se demuestra que el orden del error es 2.

Ejemplo de Ensayos Numéricos Aproximados con una Hipérbola, para definir Convergencia

En diversas situaciones del empleo de métodos numéricos se presentan sucesiones de soluciones aproximadas que convergen a un determinado valor. En el mejor de los casos, ese valor de convergencia es el valor de la solución exacta del problema a resolver.

Un ejemplo es la solución de la ecuación de la onda haciendo uso del método de separación de variables con métodos numéricos. Tema que se aborda en detalle en Ecuaciones Diferenciales a Derivadas Parciales, y aquí sólo se presenta un resumen, para poner en contexto el uso de mínimos cuadrados para determinar el valor de convergencia.

La propagación de ondas en un dominio geométrico unidimensional se describe con el siguiente modelo diferencial.

Se busca *u(x,t)* solución de la siguiente ecuación diferencial a derivadas parciales diferencial

$$T\,\frac{\partial^2(u(x,t))}{\partial x^2} = \rho\,\frac{\partial^2(u(x,t))}{\partial t^2} \qquad \text{si} \qquad x \in \Omega = \{x \in R\colon 0 \le x \le L\}$$

con $\quad u(0,t) = 0 \qquad u(L,t) = 0$; y valores iniciales dados

Se postula una solución "de variables separables" en la forma

$$u(x,t) = \phi(x)\;\eta(t)$$

que, al ser considerada en el problema original, genera dos problemas diferenciales: uno en la variable x, de valores de contorno; y otro de valores iniciales en la variable t. Estos problemas son:

Buscar $\phi(x)$ y ω^2, soluciones del siguiente problema diferencial con valores de contorno:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \omega^2\;\phi(x) = 0 \qquad \text{si} \qquad x \in \Omega = \{x \in R\colon 0 \le x \le L\}$$

con $\quad \phi(0) = 0 \qquad \phi(L) = 0$

Buscar $\eta(t)$ solución del siguiente problema diferencial con valores iniciales:

$$\frac{d^2\eta(t)}{dt^2} + \omega^2\;\eta(t) = 0 \qquad \text{si} \qquad t \ge 0;\ \text{y valores iniciales dados}$$

Resuelto primero el problema con valores de contorno en la variable x, y conocido el valor de ω^2, se proceder a resolver el problema de valores iniciales en la variable t.

Para resolver numéricamente el problema diferencial con valores de contorno en la variable x, es posible recurrir al *método de diferencias finitas* que consiste en proponer una división del dominio geométrico en un número finito de intervalos (N), y plantear un valor incógnita de la $\phi(x)$ en cada extremo de cada uno de los N intervalos. Así se tendrá una aproximación de $\phi(x)$ como una función discreta incógnita, y al usar derivación numérica se transforma el problema diferencial en x, en distintos problemas algebraicos de autovalores y autovectores de orden N-1. Así por ejemplo para el caso de N=6, se obtiene

$$A_5\,\vec{v} = \lambda\;\vec{v} \qquad\qquad \lambda = \omega^2\,\frac{\rho}{T}\;\frac{L^2}{6^2}$$

con

$$A_5 = \begin{bmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta & \alpha & \beta \\ 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha \end{bmatrix} \quad con\, \alpha = 2; \quad \beta = -1$$

Para cada discretización planteada (para cada valor de N), es de interés el menor autovalor. La solución exacta se obtiene cuando N tiende a infinito (cuando en el dominio 0<x<L se plantean infinitos valores de la $\phi(x)$). Pero, numéricamente se debe trabajar con un número finito de N.

Así se tienen las siguientes soluciones numéricas obtenidas con tres discretizaciones distintas, para tres valores distintos de N que dividen el dominio x.

N	N=4	N=6	N=8
$f(N) = \lambda\, N^2$	$0.58579 \cdot 4^2$	$0.26795 \cdot 6^2$	$0.15224 \cdot 8^2$

Usando el Método de Mínimos Cuadrados se puede obtener una aproximación de la función discreta $f(N)$, y determinar a que tiende la aproximación de $f(N)$, cuando el número de intervalos N tiende a infinito.

Se adopta como base de funciones linealmente independientes a los polinomios elementales con los que se puede generar cualquier recta en el plano; es decir

$$B_N = \{\, \boldsymbol{\varphi_0(N)} \;, \boldsymbol{\varphi_1(N)}\, \} = \{\, 1; \quad 1/N^2 \}$$

Así la aproximación que se propone es

$$P(N) = \, a_0\, 1 + \, a_1 \, \frac{1}{N^2}$$

Al comparar en cada abscisa N_i, los valores que tomará la aproximación $P(N_i)$**,** con el valor dato de la función discreta $\boldsymbol{y_i} = \boldsymbol{f}(N_i)$**,** se definen los siguientes vectores

$$\vec{\boldsymbol{r}} \;=\; \vec{\boldsymbol{f}} - \vec{\boldsymbol{P}}$$

$$\vec{\boldsymbol{r}} \;=\; \vec{\boldsymbol{f}} - \; \boldsymbol{\Phi}\, \vec{\boldsymbol{a}}$$

$$\begin{Bmatrix} r_0 \\ r_1 \\ r_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.58579 \cdot 4^2 \\ 0.26795 \cdot 6^2 \\ 0.15224 \cdot 8^2 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 1/4^2 \\ 1 & 1/6^2 \\ 1 & 1/8^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix}$$

Se trata de vectores que pertenecen al espacio vectorial Euclidiano de dimensión 3, denominado R^3, en el cual existe la norma cuadrática asociada al producto interior en la forma

$$\|\vec{\boldsymbol{v}}\|_2 = <\vec{\boldsymbol{v}}\,, \vec{\boldsymbol{v}}, >^{1/2} = \sqrt[2]{\sum_{k=1}^{3} (v_k)^2}$$

Siguiendo el planteo General de Aproximación la determinación de los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \;\; a_1\,]$, se realiza aproximando el vector $\vec{\boldsymbol{f}} \in R^3$, en el subespacio de dimensión 2, generado por los vectores columnas de la matriz **Φ,** agrupados en la base $\boldsymbol{B_v} = \{\, \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{0}}\,, \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{1}}\}$**.**

$$\vec{\boldsymbol{\varphi}}_0 = \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix}; \ \vec{\boldsymbol{\varphi}}_1 = \begin{Bmatrix} 1/4^2 \\ 1/6^2 \\ 1/8^2 \end{Bmatrix} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} 1 & 1/4^2 \\ 1 & 1/6^2 \\ 1 & 1/8^2 \end{bmatrix}$$

Los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \ a_1]$, deben ser tales que cumplan con las siguientes ecuaciones normales

$$\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}} \ \vec{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}} \left(\vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\, \vec{\boldsymbol{a}} \ \right) = \vec{\boldsymbol{0}}$$

que en este caso resultan

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1/4^2 & 1/6^2 & 1/8^2 \end{bmatrix} \left[\begin{Bmatrix} 0.58579 \cdot \ 4^2 \\ 0.26795 \cdot \ 6^2 \\ 0.15224 \cdot \ 8^2 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 1/4^2 \\ 1 & 1/6^2 \\ 1 & 1/8^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} \right] = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

Al distribuir resulta en

$$\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}} \, \boldsymbol{\Phi} \ \ \vec{\boldsymbol{a}} \ \ = \boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}} \ \vec{\boldsymbol{f}}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1/4^2 & 1/6^2 & 1/8^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1/4^2 \\ 1 & 1/6^2 \\ 1 & 1/8^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1/4^2 & 1/6^2 & 1/8^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 0.58579 \cdot \ 4^2 \\ 0.26795 \cdot \ 6^2 \\ 0.15224 \cdot \ 8^2 \end{Bmatrix}$$

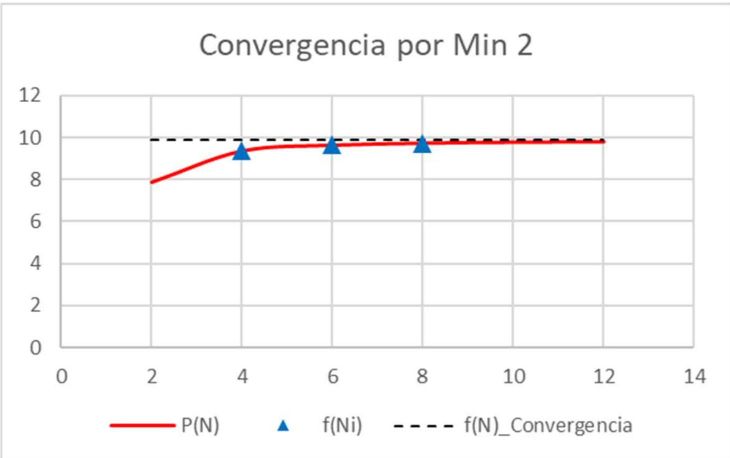
$$\begin{bmatrix} 3 & 0.1059028 \\ 0.1059028 & 0.0049220 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 28.7622 \\ 1.0060 \end{Bmatrix}$$

Así los coeficientes solución son $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \ a_1] = [9.8664; \quad -7.9042]$, y la función aproximación es

$$P(N) = \ a_0 \, 1 + \ a_1 \, \frac{1}{N^2} \ = \ 9.8664 \quad 1 \ \ - 7.9042 \ \frac{1}{N^2}$$

El valor de convergencia de $P(N)$, aproximación de la función discreta $f(N)$, cuando N tiende a infinito es 9.8664. Es posible obtener ω^2 de la igualdad $9.8664 = \omega^2 \frac{\rho}{T} \ L^2$, considerando los datos del problema original de la ecuación de la onda. Conocido el valor de convergencia, es posible "medir" el error de cada una de las soluciones obtenidas en cada división del dominio geométrico en N intervalos.

En la Figura se presentan los datos y los resultados obtenidos



Al igual que en el ejemplo anterior, a los efectos de valorar la calidad de la aproximación se pueden considerar dos conceptos complementarios entre sí: el módulo del vector residuo, y el coeficiente de correlación de Pearson.

Con la aproximación obtenida, se puede obtener el vector **residuo y su módulo o norma cuadrática, en la forma**

$$\vec{\boldsymbol{r}} = \vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\ \vec{\boldsymbol{a}}$$

Funciones discretas	$\vec{\boldsymbol{r}}$	$\vec{\boldsymbol{f}}$	$\overrightarrow{\boldsymbol{P_m}} = \boldsymbol{\Phi}\ \vec{\boldsymbol{a}}$
Valores	$\begin{Bmatrix} 1.68\,E-4 \\ -6.48\,E-4 \\ 4.8\ \ E-4 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} 0.58579\cdot 4^2 \\ 0.26795\cdot 6^2 \\ 0.15224\cdot 8^2 \end{Bmatrix}$	$\begin{Bmatrix} 9.372472 \\ 9.646848 \\ 9.74288 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1/4^2 \\ 1 & 1/6^2 \\ 1 & 1/8^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix}$
Norma 2 de un vector $\Vert\vec{\boldsymbol{v}}\Vert_2 = <\vec{\boldsymbol{v}}, \vec{\boldsymbol{v}}, >^{1/2}$	6.79 E-7	2.7583 E+2	2.7583 E+2

Al comparar $\Vert\vec{\boldsymbol{r}}\Vert_2$= 6.79 E-7 con $\Vert\vec{\boldsymbol{f}}\Vert_2$= 2.7583 E+2, se tiene un coeficiente de "error relativo"

$$\Vert\vec{\boldsymbol{r}}\Vert_2/\Vert\vec{\boldsymbol{f}}\Vert_2 = 6.79\text{ E-7} / 2.7583\text{ E+2} = 2.46\text{ E-9}$$

que según sea la aplicación o problema a resolver, se puede considerar un indicador aceptable.

El Coeficiente de Correlación de Pearson resulta para este caso en r= 0.99999541, lo que indica una correlación muy alta entre la función discreta $\boldsymbol{f}$ y la aproximación $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{N})$ obtenida por el método de mínimos cuadrados.

Ejemplo de Datos Numéricos Aproximados con una función Potencial, para definir Orden de Error

Siguiendo con el ejemplo anterior, es posible analizar de qué forma evolucionan las soluciones numéricas aproximadas del problema diferencial con valores de frontera, hacia la solución de convergencia obtenida con el método de mínimos cuadrados.

Para ello se define la función discreta error como la diferencia entre la solución de convergencia y cada solución numérica aproximada (9.86635).

N_i	4	6	8
$f(N_i)$	9,37264	9,6462	9,74336
$f(N)\_Convergencia$	9,86635	9,86635	9,86635
$Error\ (N_i)$	0,49371	0,22015	0,12299

Se tiene así una función discreta $Error\ (N_i)$ con 3 puntos como datos, y se pretende una representación continua, que siguiendo la expresión habitual de errores que se encuentra en análisis numérico, se propone en la forma exponencial

$$Error\ (N) = A\ N^b$$

Para aplicar el método de mínimos cuadrados es conveniente hacerlo luego de aplicar logaritmos a la forma exponencial propuesta. Así resulta

$$\ln\big(Error\ (N)\big) = \ln(A) + b\ \ln(N)$$

que es una aproximación lineal de los logaritmos naturales de los datos discretos. Es decir:

$$\mathrm{y} = a_0 + a_1\ \ \mathrm{x}$$

con lo cual las equivalencias son:

$$\mathrm{y} = \ln\big(Error\ (N)\big) \qquad x = \ln(N) \qquad a_0 = \ln(A) \quad a_1 = b$$

y los datos para usar en mínimos cuadrados son

$x = \ln(N_i)$	$\ln(4)$	$\ln(6)$	$\ln(8)$
$y = \ln(Error(N_i))$	ln(0,49371)	ln(0,22015)	ln(0,12299)

Para la aproximación lineal entre x e y, la base de funciones es B=$\{1,\ \mathrm{x}\}$, de modo que resulta

$$\vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{0}} = \begin{Bmatrix}1\\1\\1\end{Bmatrix};\ \ \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{1}} = \begin{Bmatrix}\ln(4)\\\ln(6)\\\ln(8)\end{Bmatrix} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix}1 & \ln(4)\\1 & \ln(6)\\1 & \ln(8)\end{bmatrix}$$

Los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0;\ a_1\ ]$, deben ser tales que cumplan con las siguientes ecuaciones normales

$$\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \vec{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ (\ \vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\,\vec{\boldsymbol{a}}\ ) = \vec{\mathbf{0}}$$

$$\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \boldsymbol{\Phi}\ \ \vec{\boldsymbol{a}}\ \ = \boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \vec{\boldsymbol{f}}$$

$$\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\\ln(4) & \ln(6) & \ln(8)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & \ln(4)\\1 & \ln(6)\\1 & \ln(8)\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}a_0\\a_1\end{Bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\\ln(4) & \ln(6) & \ln(8)\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}\ln(0.49371)\\\ln(0,22015)\\\ln(0,12299)\end{Bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 5.2575 \\ 5.2575 & 9.4563 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} -4.3149 \\ -8.0480 \end{Bmatrix}$$

Así los coeficientes solución son $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \;\; a_1\,] = [2.0742; \quad -2.004]$, y la función aproximación es

$$\mathrm{y} = \quad a_0\, 1 + \; a_1\, \mathrm{x} \; = \; 2.0742 \quad 1 \; - 2.004\, \mathrm{x}$$

$$\ln(Error(N)) = \; a_0\, 1 + \; a_1 \ln(N) \; = \; 2.0742 \quad 1 \; - 2.004 \; \ln(N)$$

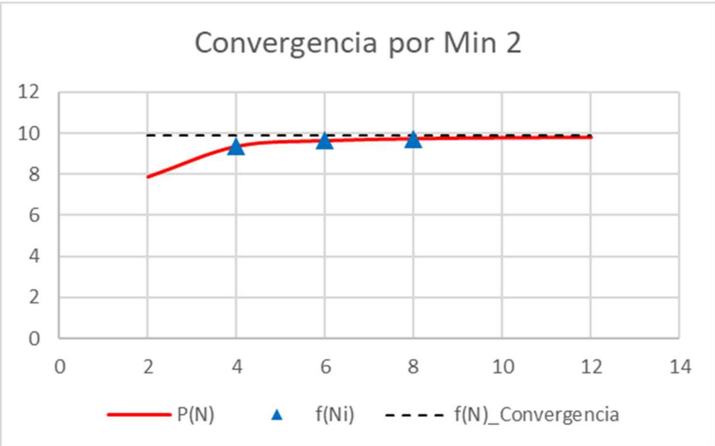
que es posible expresar como

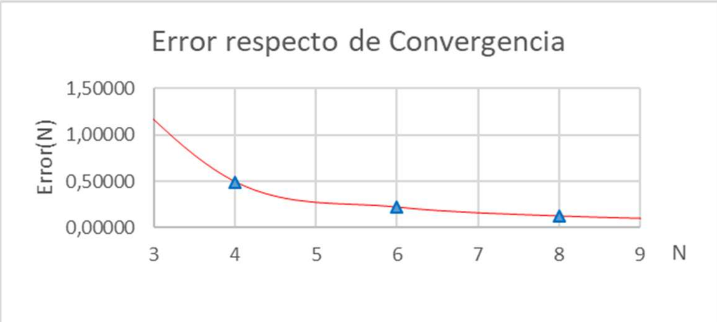
$$Error\ (N) = A\, N^b \, = e^{2.0742} \;\; N^{(-2.004)}$$

o bien

$$Error\ (N) = A\, N^b \, = 7.9578 \;\left(\frac{1}{N}\right)^{2.004}$$

Es oportuno destacar que, para el problema tratado, N es el número de intervalos en el cual se divide el dominio geométrico de los números reales entre 0 y L. Por lo tanto, la magnitud (1/N) es la distancia "Δ_x" en el eje de las abscisas de los puntos de la función discreta $\phi(x)$ obtenida en cada solución del método de diferencias finitas. De este modo se tiene que el orden del error es 2, respecto del valor de convergencia.

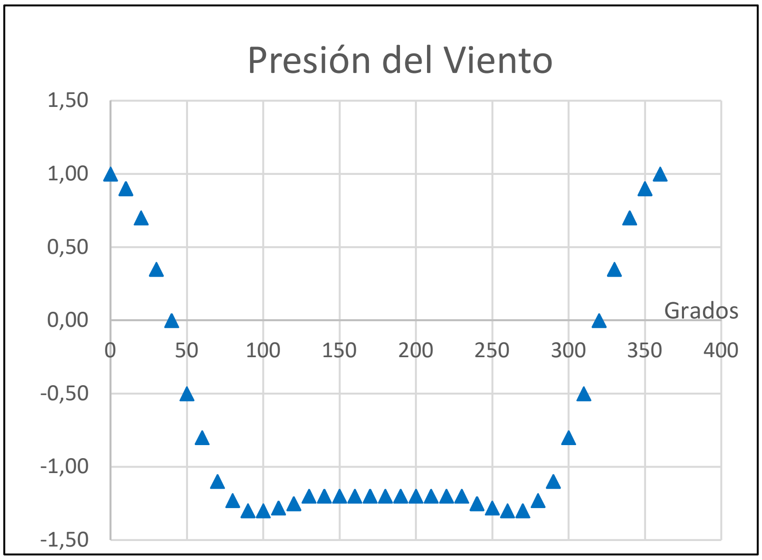




Ejemplo de Datos Experimentales Aproximados con funciones Trigonométricas, para Reducir orden de almacenamiento

La presión que ejerce el viento sobre distintas superficies es de mucho interés en distintas aplicaciones de ingeniería. La presión del viento son cilindros circulares, es un caso de mucho estudio y una referencia en el tema. El Reglamento Argentino de acciones de Viento (CIRSOC 102) tiene para ese caso los datos de presión de viento como una función discreta de la posición angular. Se trata de 36 puntos igualmente distribuidos en los 360 grados de la circunferencia, que son datos en la siguiente tabla, y que están representados en la siguiente figura

Angulo en grados θ_i	Presión $\boldsymbol{f}(\theta_i)$
0	1,00
10	0,90
20	0,70
30	0,35
40	0,00
50	-0,50
60	-0,80
70	-1,10
80	-1,23
90	-1,30
100	-1,30
110	-1,28
120	-1,25
130	-1,20
140	-1,20
150	-1,20
160	-1,20
170	-1,20
180	-1,20
190	-1,20
200	-1,20
210	-1,20
220	-1,20
230	-1,20
240	-1,25
250	-1,28
260	-1,30
270	-1,30
280	-1,23



Se puede observar que se trata de una función que es no sólo periódica, sino también par (o simétrica respecto al origen o a 180 grados).

Resulta de interés encontrar una representación continua mediante una aproximación usando el método de mínimos cuadrados. Por tratarse de una función periódica, es posible recurrir a armar una base con funciones trigonométricas; y en particular, por tratarse de una función par, se pueden usar funciones coseno.

Así la base de funciones a utilizar es:

$$B_M = \{\ \boldsymbol{\varphi_0(x)}\ ,\boldsymbol{\varphi_1(x)} \ldots.\boldsymbol{\varphi_M(x)}\ \}$$

$$B_M = \{\ 1;\quad \cos(x)\,;\ \ \cos(2x)\,;\ \ldots\ldots \cos(kx)\}$$

con k=0 a M. (M debe ser un número finito menor o igual a N=36 que es la cantidad de puntos datos). Se debe destacar

290	-1,10
300	-0,80
310	-0,50
320	0,00
330	0,35
340	0,70
350	0,90
360	1,00

que es conveniente calcular los cosenos con $x_i(rad) = \theta_i\ (grados) * \pi/180$.

Así la aproximación que se propone es

$$P(x) = a_0\, 1 + \sum_{k=1}^{M} a_k \cos(kx) = \sum_{k=0}^{M} a_k\ \cos(kx)$$

Se trata de una combinación lineal de un número finito (M+1) de una función coseno con frecuencia k, y amplitud dada por el coeficiente a_k.

En general el número (M+1) de sumandos en menor al número de puntos datos. A lo sumo, podrá ser igual.

Al comparar en cada abscisa x_i, los valores que tomará la aproximación $P(x_i)$**,** con el valor dato de la función discreta $\boldsymbol{y_i} = \boldsymbol{f}(x_i)$**,** se definen los siguientes vectores

$$\vec{\boldsymbol{r}} = \vec{\boldsymbol{f}} - \vec{\boldsymbol{P}}$$

$$\vec{\boldsymbol{r}} = \vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\, \vec{\boldsymbol{a}}$$

$$\begin{Bmatrix} r_0 \\ \vdots \\ \vdots \\ r_{35} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f0 \\ \vdots \\ \vdots \\ f35 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & \cos(Mx_0) \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \cos(Mx_{35}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_M \end{Bmatrix}$$

Se trata de vectores que pertenecen al espacio vectorial Euclidiano de dimensión 36, denominado R^{36}, en el cual existe la norma cuadrática asociada al producto interior en la forma

$$\|\vec{\boldsymbol{v}}\|_2 = < \vec{\boldsymbol{v}}\, , \vec{\boldsymbol{v}}, >^{1/2} = \sqrt[2]{\sum_{k=1}^{36} (v_k)^2}$$

Siguiendo el planteo General de Aproximación los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \ldots.\ a_M\ ]$, se determinan aproximando el vector $\vec{\boldsymbol{f}} \in R^{36}$, en el subespacio de dimensión M+1, generado por los vectores columnas de la matriz $\boldsymbol{\Phi}$**,** agrupados en la base $\boldsymbol{B_x} = \{\vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{0}}\, , \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{1}} \ldots \ldots \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{M}}\}$**.**

$$\vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{0}} = \begin{Bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{Bmatrix};\ \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{1}} = \begin{Bmatrix} \cos(x_0) \\ \vdots \\ \cos(x_{35}) \end{Bmatrix} \quad \ldots \ldots\ \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{M}} = \begin{Bmatrix} \cos(Mx_0) \\ \vdots \\ \cos(Mx_{35}) \end{Bmatrix} \rightarrow \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} 1 & \cos(Mx_0) \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \cos(Mx_{35}) \end{bmatrix}$$

Los coeficientes $\vec{\boldsymbol{a}} = [a_0; \ldots.\ a_M\ ]$, deben ser tales que cumplan con las siguientes ecuaciones normales

$$\boldsymbol{\Phi^T}\ \vec{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{\Phi^T} \left(\vec{\boldsymbol{f}} - \boldsymbol{\Phi}\, \vec{\boldsymbol{a}}\ \right) = \vec{\boldsymbol{0}}$$

Al distribuir resulta en

$$\boldsymbol{\Phi^T}\, \boldsymbol{\Phi}\ \ \vec{\boldsymbol{a}} = \boldsymbol{\Phi^T}\ \vec{\boldsymbol{f}}$$

que en este caso resultan

$$\begin{bmatrix} 1 & \ldots\ldots\ldots\ldots.. & 1 \\ \cos(Mx_0) & \ldots.. & \cos(Mx_{35}) \end{bmatrix} \left[\begin{Bmatrix} f0 \\ \vdots \\ \vdots \\ f35 \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & \cos(Mx_0) \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \cos(Mx_{35}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_M \end{Bmatrix} \right] = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & \ldots\ldots\ldots\ldots.. & 1 \\ \cos(Mx_0) & \ldots.. & \cos(Mx_{35}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \cos(Mx_0) \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ 1 & \cos(Mx_{35}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_M \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \ldots\ldots.. & 1 \\ \cos(Mx_0) & .. & \cos(Mx_{35}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f0 \\ \vdots \\ \vdots \\ f35 \end{Bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 36 & \ldots & 0 \\ 0 & 18 & 0 \\ 0 & \ldots & 18 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_M \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \ldots\ldots.. & 1 \\ \cos(Mx_0) & .. & \cos(Mx_{35}) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} f0 \\ \vdots \\ \vdots \\ f35 \end{Bmatrix}$$

Es oportuno destacar que la matriz de Gram $\boldsymbol{\Phi}^{\boldsymbol{T}}\ \boldsymbol{\Phi}$ es una matriz diagonal, ya que las funciones trigonométricas seno y coseno son ortogonales cuando se las integra en un período. En la versión discreta la integración es equivalente al producto interior (producto escalar) entre dichas funciones discretas. El sistema de ecuaciones normales es simple de resolver, y los coeficientes solución $\vec{\boldsymbol{a}}$ se los puede calcular en forma independiente entre sí; y resultan:

$$a_0 = \frac{< \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{0}}\,, \vec{\boldsymbol{f}}\ >}{36} = \frac{1}{36}\sum_{k=0}^{35} f_k$$

que es el valor promedio de las componentes de los datos $\vec{\boldsymbol{f}}$. Mientras que los coeficientes para k=1 a M se calculan con el producto interior (o escalar) del vector de datos con cada columna de la matriz $\boldsymbol{\Phi}$, dividido la mitad del número de puntos datos (dimensión del espacio R^{36}, en este caso).

$$a_k = \frac{< \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{k}}\,, \vec{\boldsymbol{f}}\ >}{18} = \frac{1}{18}\{f_0 \quad \ldots \quad f_{35}\} \begin{Bmatrix} \cos(kx_0) \\ \vdots \\ \cos(kx_{35}) \end{Bmatrix}$$

La función aproximación es

$$P(x) = \ a_0\, 1 + \sum_{k=0}^{35} [a_k \ \ \cos(kx)]$$

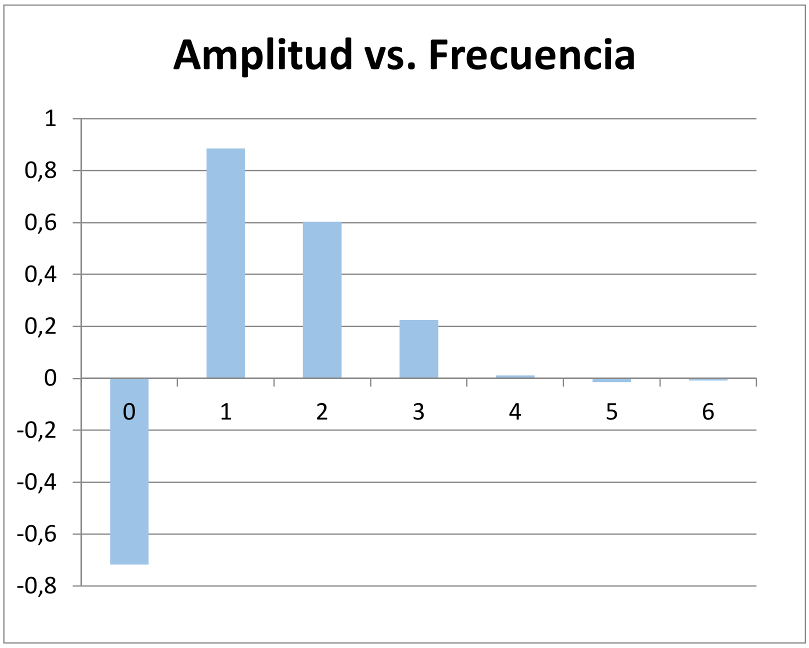
$$P(x) = \frac{1}{36}\sum_{k=0}^{35} f_k + \sum_{k=0}^{35} [\frac{< \vec{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{k}}\,, \vec{\boldsymbol{f}}\ >}{18} \ \ \cos(kx)]$$

Calculados los coeficientes a_k (con k=0 a M), es posible graficarlos en función de la frecuencia k (o armónica k) al que está asociado, y dicha grafica se denomina espectro de frecuencias discreto.

En la siguiente tabla se presentan para el ejemplo en tratamiento los valores del espectro de frecuencias para las primeras siete frecuencias.

Frecuencia k	0	1	2	3	4	5	6
Amplitud a_k	-0,717	0,885	0,603	0,225	0,0124	-0,0148	-0,0083

En la siguiente Figura se presenta el espectro de frecuencias en forma de gráfica de barras.

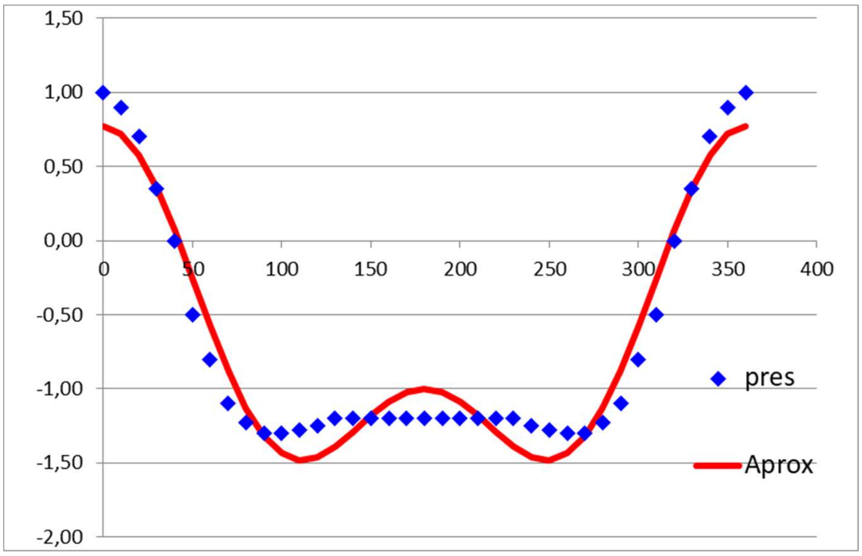


Es posible visualizar que para las 4 primeras frecuencias las amplitudes son del orden de las decenas, mientras que las frecuencias 4, 5 y 6 tienen amplitudes del orden de la centésima. En base a esta diferencia es que resulta posible reducir el orden de datos a almacenar.

Si se considera una aproximación reteniendo las tres primeras frecuencias; es decir

$$P_{02}(x) = -0.717 + 0.885 \cos(x) + 0.603 \cos(2x)$$

se obtiene una función aproximación que se puede apreciar en la siguiente Figura conjuntamente con la función discreta de datos.

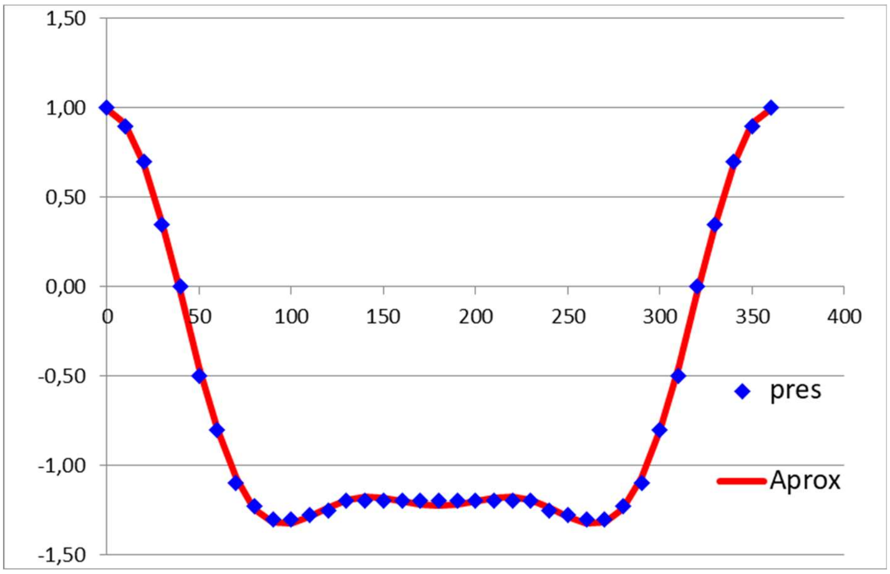


Se puede observar que si bien la aproximación $P_{02}(x)$ sigue la forma de la función discreta, en los valores máximos y mínimos hay cierta diferencia.

Es conveniente agregar una armónica más en la aproximación, y así se tiene

$$P_{03}(x) = -0.717 + 0.885 \cos(x) + 0.603\cos(2x) + 0.225\cos(3x)$$

En la siguiente figura se puede observar la aproximación $P_{03}(x)$ conjuntamente con la función discreta dato y no hay diferencias significativas a simple vista. Se debe recurrir a medir la diferencia con la norma del residuo, por ejemplo.



Al evaluar la norma del residuo se tiene que $\|\vec{\boldsymbol{r}}\|_2$= 0.134 mientras que la norma de los datos es $\|\vec{\boldsymbol{f}}\|_2$= 6.33, se tiene un coeficiente de "error relativo" $\|\vec{\boldsymbol{r}}\|_2/\|\vec{\boldsymbol{f}}\|_2$= 0.134 / 6.33 = 0.021. Por otra parte, el Coeficiente de Pearson resulta 0.9996

Si se retiene una armónica más la aproximación resulta

$$P_{04}(x) = -0.717 + 0.885 \cos(x) + 0.603\cos(2x) + 0.225\cos(3x) + 0.02\cos(4x)$$

y la norma del residuo se tiene que $\|\vec{\boldsymbol{r}}\|_2$= 0.124 mientras que la norma de los datos es $\|\vec{\boldsymbol{f}}\|_2$= 6.33, se tiene un coeficiente de "error relativo" $\|\vec{\boldsymbol{r}}\|_2/\|\vec{\boldsymbol{f}}\|_2$= 0.124 / 6.33 = 0.019. El Coeficiente de Pearson es 0.9996.

Al establecer la aproximación con las frecuencias de 0 a seis, la norma del residuo se tiene que $\|\vec{\boldsymbol{r}}\|_2$= 0.1 mientras que la norma de los datos es $\|\vec{\boldsymbol{f}}\|_2$= 6.33, se tiene un coeficiente de "error relativo" $\|\vec{\boldsymbol{r}}\|_2/\|\vec{\boldsymbol{f}}\|_2$= 0.1 / 6.33 = 0.0159. El Coeficiente de Pearson es 0.9997.

En síntesis,

en el ejemplo tratado se puede trabajar con la aproximación

$$\boldsymbol{P_{03}(x) = -0.717 + 0.885 \cos(x) + 0.603\cos(2x) + 0.225\cos(3x)}$$

que significa retener 4 puntos en el dominio de la frecuencia dados en el espectro, limitado a las 4 primeras frecuencias; en lugar de trabajar con los 36 puntos originales

En síntesis (a revisar):

Dado un elemento "$\boldsymbol{y}$" que pertenece al espacio vectorial V ($\boldsymbol{y} \in$ V,) se busca una aproximación "$\boldsymbol{p}$", tal que sean cercanos entre sí.

- $\boldsymbol{y} \in$ V, teniendo V una dimensión determinada.
- Existe un **producto interior en V,** que se indica como <f, g>, para dos elementos f y g cualesquiera, pertenecientes al Espacio Vectorial V. Entre otras propiedades, el producto interior tiene la propiedad de distribución respecto de la suma o la resta.
- Se define la norma cuadrática asociada al producto interior $\|f\|_2 = <\text{f}, \ \text{f}>^{1/2}$, con la cual es posible medir la aproximación.
- $\boldsymbol{p}$ pertenece a un subespacio π de V, de dimensión finita N, menor a la dimensión de V, donde se elige una base B=$\{\boldsymbol{\varphi_1}, \boldsymbol{\varphi_2} \dots \boldsymbol{\varphi_N}\}$ y se expresa la aproximación en la forma

$$\boldsymbol{p} = \sum_{k=1}^{N} a_k \, \boldsymbol{\varphi_k}$$

- Los coeficientes de la combinación lineal, que define la aproximación $\boldsymbol{p}$ se obtienen resolviendo las **ecuaciones normales**

$$0 =< \boldsymbol{\varphi_k}, \left(\boldsymbol{y} \, - \sum_{i=1}^{N} a_i \, \boldsymbol{\varphi_i} \right) > = < \boldsymbol{\varphi_k}, \boldsymbol{r} >$$