

APROXIMACIÓ DE FUNCIONS

• Sistemes sobre determinats.

Considerem un sistema lineal

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1m} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$\boxed{A \cdot x = b}$$

(n x m)

Si $n > m$ el sistema s'anomena sobre determinat, ja que té més equacions que incògnites. En general no tindrà solució, i ens hauran de conformar amb la "millor solució" d'acord amb un criteri donat.

Criteri d'aproximació per mínims quadrats: $\left[\text{buscar a pret } x \in \mathbb{R}^m \text{ que minimitzi } \|b - Ax\| \right]$.

↑
(norma: si $v = (v_1, \dots, v_n)$,
 $\|v\| = \sqrt{\langle v, v \rangle} = \sqrt{v_1^2 + \dots + v_n^2}$)

Una manera de trobar la "millor solució" és resoldre el sistema d'equacions normals:

$$\boxed{A^T A \cdot x = A^T b}$$

← prové de fer la projecció ortogonal de b sobre el subespai generat per les columnes de A :
 $A^T(b - Ax) = 0$

- la matriu $A^T A$ és $m \times m$ i simètrica
- si rang $A = m$ (màxim) $\Rightarrow \det(A^T A) \neq 0$ (de fet, és definida positiva).

Aproximació polinòmica per mínims quadrats.

Considerem una funció $y = f(x)$, de la qual només coneixem el seu valor en uns punts donats x_0, x_1, \dots, x_n (abscisses o nodes):
 $f_0 = f(x_0), f_1 = f(x_1), \dots, f_n = f(x_n)$.

Aquests valors (que poden ser exactes o aproximats), en general seran el resultat d'algun càlcul numèric o un cert experiment.

[Objectiu]. aproximar $f(x)$ per un polinomi $p(x)$ de grau $\leq k$ (amb k donada).

El conjunt $\mathcal{P}_k = \{ \text{polinomis de grau } \leq k \}$ és un esp. vectorial de dim. $k+1$.

→ té una base $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_k(x)$

Possibles bases: $\left\{ \begin{array}{l} - \text{ els monomis } 1, x, \dots, x^k \rightarrow p(x) = c_0 + c_1 x + \dots + c_k x^k \\ - \text{ polinomis ortogonals (venem com es construïxen)} \end{array} \right.$

Escriurem $p(x) = c_0 \varphi_0(x) + \dots + c_k \varphi_k(x)$,
on c_0, \dots, c_k són coeficients a determinar.

Si impossem $p(x_i) = f_i$, $i=0, \dots, n$, obtenim un sistema lineal per als coeficients:

$$c_0 \varphi_0(x_i) + \dots + c_k \varphi_k(x_i) = f_i \quad i=0, \dots, n.$$

(n+1 eqs., k+1 incògnites)

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \dots & \varphi_k(x_0) \\ \vdots & & \vdots \\ \varphi_0(x_n) & \dots & \varphi_k(x_n) \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_k \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} f_0 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}}_b$$

$A \leftarrow (n+1) \times (k+1)$

- Si $k=n$, el sistema és $(n+1) \times (n+1)$ i es comprova que $\det A \neq 0$.

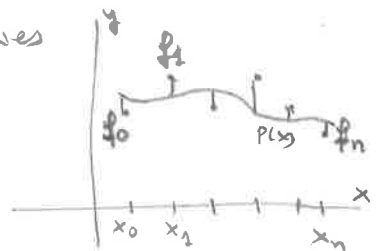
Llavors, tenim una única solució (c_0, \dots, c_k) , que ens dona el polinomi interpolador de f en els punts x_0, \dots, x_n .

Si n és gran, té l'inconvenient que els polinomis de grau elevat tenen un comportament molt oscil·latori (fenomen de Runge). Llavors, en general el polinomi $p(x)$ serà molt diferent de la funció $f(x)$, per a $x \neq x_0, \dots, x_n$.

Això encara és més greu si només coneixem els valors f_0, \dots, f_n aproximadament, ja que aquest error afecta molt al polinomi interpolador $p(x)$.

- Si $k < n$, el sistema és sobredeterminat. En general, no podem aconseguir $p(x_i) = f_i \quad \forall i$, i demanarem que les diferències $d_i = f_i - p(x_i)$ siguin el més petites possible.

En l'aproximació per mínims quadrats, demanem que que $\sum_{i=0}^n d_i^2$ sigui mínima.



(altres opcions serien: $\sum_{i=0}^n |d_i|$ mínima, $\max_{i=0, \dots, n} |d_i|$ mínima, etc.)

Deduïm el sistema d'eqs normals:

Hem de trobar c_0, \dots, c_k que facin mínima la funció

$$F(c_0, \dots, c_k) = \sum_{i=0}^n (f_i - c_0 \varphi_0(x_i) - \dots - c_k \varphi_k(x_i))^2$$

$$\rightarrow 0 = \frac{\partial F}{\partial c_j} = -2 \sum_{i=0}^n \varphi_j(x_i) (f_i - c_0 \varphi_0(x_i) - \dots - c_k \varphi_k(x_i))^2 =$$

$$(j=0, \dots, n) = -2 \cdot [\langle \varphi_j, f \rangle - c_0 \langle \varphi_j, \varphi_0 \rangle - \dots - c_k \langle \varphi_j, \varphi_k \rangle]$$

$$\Rightarrow \langle \varphi_j, \varphi_0 \rangle c_0 + \dots + \langle \varphi_j, \varphi_k \rangle c_k = \langle \varphi_j, f \rangle, \quad j=0, \dots, n.$$

Def producte escalar associat als punts x_0, \dots, x_n :

si f, g funcions,

$$\langle f, g \rangle = \sum_{i=0}^n f(x_i) g(x_i).$$

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}$$

Obtenim el sistema d'equacions normals:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & \dots & \langle \varphi_0, \varphi_k \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \varphi_k, \varphi_0 \rangle & \dots & \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle \end{pmatrix}}_{\text{ATA}} \underbrace{\begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_k \end{pmatrix}}_{\text{ATb}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \langle \varphi_0, f \rangle \\ \vdots \\ \langle \varphi_k, f \rangle \end{pmatrix}}_{\text{b}}$$

(k+1) x (k+1)

Resolent-lo, obtenim el polinomi:

$p = c_0 \varphi_0 + \dots + c_k \varphi_k \in \mathcal{P}_k$ tal que la suma $\sum_{i=0}^n d_i^2$ és mínima.

Notes

(a) De les eq. normals deduint:

$$\langle \varphi_j, p \rangle = \langle \varphi_j, f \rangle, \quad j=0, \dots, n.$$

$$\langle p, p \rangle = \langle p, f \rangle$$

$$\langle p, f-p \rangle = 0 \quad (\text{el polinomi } p \text{ és la projecció ortogonal de } f \text{ sobre l'espai } \mathcal{P}_k)$$

(b) Tenim: $\sum_{i=0}^n d_i^2 = \langle f-p, f-p \rangle = \langle f, f \rangle - \langle p, p \rangle$

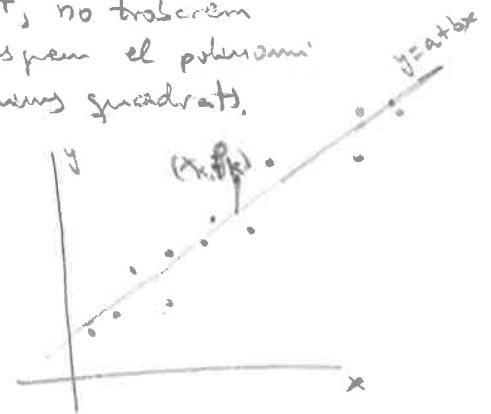
(c) La desviació quadràtica mitjana és: $\sqrt{\frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n d_i^2}$

Exemple: recta de regressió

Tenim un conjunt de dades (x_i, f_i) , $i=0, \dots, n$, que sospitem que satisfan una relació del tipus $y = a + bx$. Però per errors en les dades o perquè el model lineal no és prou acurat, no trobem cap recta que passi per tots els punts. Llavors, busquem el polinomi de grau 1 que ens doni la millor aprox. per mínims quadrats.

Escrivim $p(x) = a + bx = a \varphi_0(x) + b \varphi_1(x)$,
amb $\varphi_0(x) = 1$, $\varphi_1(x) = x$.

Sistema sobredeterminat: $\begin{pmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$



Sistema d'eq. normals: $\begin{pmatrix} n+1 & x_0 + \dots + x_n \\ x_0 + \dots + x_n & x_0^2 + \dots + x_n^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 + \dots + f_n \\ x_0 f_0 + \dots + x_n f_n \end{pmatrix}$

P. ex., per a la taula

x	0.25	0.5	0.75	1
f	0.4	0.5	0.9	1.28

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 4 & 2.5 \\ 2.5 & 1.875 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.08 \\ 2.305 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a = 0.01 \\ b = 1.216 \end{cases}$$

$$y = 0.01 + 1.216x$$

Calculant: $\begin{matrix} p(x_i) & 0.314 & 0.618 & 0.922 & 1.226 \\ d_i & 0.086 & -0.118 & -0.022 & 0.054 \end{matrix} \Rightarrow \text{Desv. quadr. mitjana} = 0.0786130$

Obs. Per resoldre el sistema d'eqs normals, cal haver calculat tots els productes escalars $\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle$ que formen la matriu ATA, en total $(k+1)^2$. Així pot ser costós si el nombre $n+1$ de punts és gran. A més, en alguns casos la matriu ATA pot ser "mal condicionada" des del punt de vista numèric (petits errors d'arrodoniment en el càlcul dels coeficients donen lloc a importants errors a la solució). Aquests problemes es poden evitar usant polinomis ortogonals, per als quals la matriu ATA és diagonal.

Polinomis ortogonals.

Ara considerem, per a l'espai $P_k = \{ \text{polinomis de grau } \leq k \}$, una base $\varphi_0(x), \dots, \varphi_k(x)$ tal que:

- cada $\varphi_i(x)$ és un polinomi de grau i , mènica (coef. principal = 1)
- els $\varphi_i(x)$ són ortogonals sobre x_0, \dots, x_n :
 $\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = 0$ si $i \neq j$

(Obs. cada φ_i és ortogonal a $\varphi_0, \dots, \varphi_{i-1} \Rightarrow \varphi_i$ ortogonal a tots els polinomis de grau $\leq i-1$.
 Llavors, la matriu $A^T A$ és diagonal; i directament obtenim la solució:

$$A^T A = \begin{pmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle \end{pmatrix} \Rightarrow c_i = \frac{\langle \varphi_i, f \rangle}{\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle}, \quad i=0, \dots, k.$$

[Obs. El polinomi obtingut $p = c_0 \varphi_0 + \dots + c_k \varphi_k$ compleix $\langle p, f \rangle = c_0^2 \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle + \dots + c_k^2 \langle \varphi_k, \varphi_k \rangle$
 Comprovem que els polinomis ortogonals es poden calcular mitjançant una recorrència, que els determina de manera única.

$$\begin{cases} \varphi_{i+1}(x) = (x - \beta_i) \varphi_i(x) - \gamma_i \varphi_{i-1}(x), & i=0, 1, \dots, k-1, \\ \varphi_0(x) = 1, & \varphi_{-1}(x) = 0, & \text{essent } \begin{cases} \beta_i = \frac{\langle x, \varphi_i^2 \rangle}{\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle}, & i \geq 0 \\ \gamma_i = \frac{\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle}{\langle \varphi_{i-1}, \varphi_{i-1} \rangle}, & i \geq 1 \\ (\gamma_0 = 0) \end{cases} \end{cases}$$

Prova per inducció sobre i , comprovem que cada φ_i és ortogonal als anteriors: $\varphi_0, \dots, \varphi_{i-1}$.

$i=1$
 $\varphi_1 = x - \beta_0, \quad \langle \varphi_1, \varphi_0 \rangle = \langle x - \beta_0, 1 \rangle = \langle x, 1 \rangle - \beta_0 \langle 1, 1 \rangle = 0 \Rightarrow \beta_0 = \frac{\langle x, 1 \rangle}{\langle 1, 1 \rangle}$
 (obs. $\langle 1, 1 \rangle = n+1, \quad \langle x, 1 \rangle = \sum_{j=0}^n x_j$)

$i \geq 2$
 $\varphi_{i+1} = (x - \beta_i) \varphi_i - \gamma_i \varphi_{i-1}$
 $0 = \langle \varphi_{i+1}, \varphi_i \rangle = \langle x \varphi_i, \varphi_i \rangle - \beta_i \langle \varphi_i, \varphi_i \rangle - \gamma_i \langle \varphi_{i-1}, \varphi_i \rangle \Rightarrow \beta_i = \frac{\langle x \varphi_i, \varphi_i \rangle}{\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle} = \frac{\langle x, \varphi_i^2 \rangle}{\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle}$
 (0 hyp. inducc.)

$0 = \langle \varphi_{i+1}, \varphi_{i-1} \rangle = \langle x \varphi_i, \varphi_{i-1} \rangle - \beta_i \langle \varphi_i, \varphi_{i-1} \rangle - \gamma_i \langle \varphi_{i-2}, \varphi_{i-1} \rangle$
 (0 hyp. ind.)

$\Rightarrow \gamma_i = \frac{\langle x \varphi_i, \varphi_{i-1} \rangle}{\langle \varphi_{i-1}, \varphi_{i-1} \rangle} = \frac{\langle \varphi_i, \varphi_i \rangle}{\langle \varphi_{i-1}, \varphi_{i-1} \rangle}$

si $0 \leq j \leq i-2$,

$\langle \varphi_{i+1}, \varphi_j \rangle = \langle x \varphi_i, \varphi_j \rangle - \beta_i \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle - \gamma_i \langle \varphi_{i-1}, \varphi_j \rangle =$ (hyp. ind.) $\rightarrow 0$
 $= \langle \varphi_i, x \varphi_j \rangle = 0$ ja que $x \varphi_j$ té grau $j+1 \leq i-1$.

Exemple

x	0.25	0.5	0.75	1
f	0.4	0.5	0.9	1.28

→ problema d'aproximació quadràtica per mínims quadrats ("paràbola de regressió")

Buscarem l'aproximació usant polinomis ortogonals:

$$p(x) = c_0 \varphi_0(x) + c_1 \varphi_1(x) + c_2 \varphi_2(x)$$

(una altra possibilitat seria buscar $p(x) = b_0 + b_1 x + b_2 x^2$ → mètode polinomi)



Primer, construïm els polinomis ortogonals usant la recurrència,

$$\varphi_0 = 1$$

$$\varphi_1 = (x - \beta_0) \varphi_0 = x - 0.625$$

$$\leftarrow \beta_0 = \frac{\langle x, \varphi_0^2 \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{\langle x, 1 \rangle}{\langle 1, 1 \rangle} = \frac{2.5}{4} = 0.625$$

$$\begin{aligned} \varphi_2 &= (x - \beta_1) \varphi_1 - \gamma_1 \varphi_0 = \\ &= (x - 0.625)^2 - 0.078125 = \\ &= x^2 - 1.25x + 0.3125 \end{aligned}$$

$$\leftarrow \beta_1 = \frac{\langle x, \varphi_1^2 \rangle}{\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle} = \frac{0.1953125}{0.3125} = 0.625$$

$$\leftarrow \gamma_1 = \frac{\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{0.3125}{4} = 0.078125$$

Sol. del sistema d'eqs. normals:

$$c_0 = \frac{\langle \varphi_0, f \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{3.08}{4} = 0.77,$$

$$c_1 = \frac{\langle \varphi_1, f \rangle}{\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle} = \frac{0.38}{0.3125} = 1.216.$$

$$c_2 = \frac{\langle \varphi_2, f \rangle}{\langle \varphi_2, \varphi_2 \rangle} = \frac{0.0175}{0.015625} = 1.12$$

$$\Rightarrow p(x) = 0.77 + 1.216(x - 0.625) + 1.12(x^2 - 1.25x + 0.3125) = \underline{0.36 - 0.184x + 1.12x^2}$$

Podem calcular directament la desv. quadràtica mitjana, usant:

$$\sum_{i=0}^3 d_i^2 = \langle f, f \rangle - \langle p, p \rangle = \langle f, f \rangle - c_0^2 \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle - c_1^2 \langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle - c_2^2 \langle \varphi_2, \varphi_2 \rangle$$

$$\Rightarrow \sqrt{\frac{1}{4} \sum_{i=0}^3 d_i^2} = 0.0357771$$

Aproximació de Fourier o trigonomètrica.

Volem aproximar una funció $y=f(x)$, que sabem que és 2π -periòdica

Suposem que en coneixem el valor en un cert nombre d'abscisses equidistants:

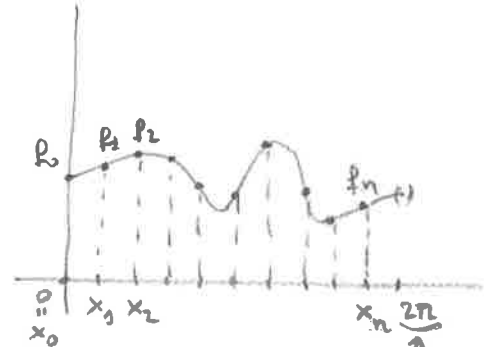
$$x_s = s \cdot \frac{2\pi}{n+1} \in [0, 2\pi], \quad s=0, \dots, n.$$

$$f_s = f(x_s) \quad \left(\begin{array}{l} \uparrow \\ \text{0 ve } [-\pi, \pi], \text{ o un altre} \\ \text{interval de long. } 2\pi \end{array} \right)$$

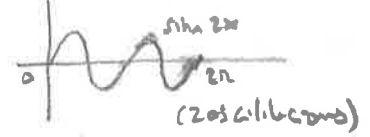
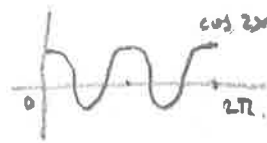
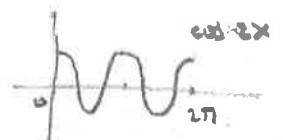
L'objectiu serà aproximar $f(x)$ per un polinomi trigonomètric de grau $\leq l$ (amb l'condició),

$$p(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{j=1}^l (a_j \cos jx + b_j \sin jx)$$

($2l+1$ coef. a determinar)



(No el donem, $j=0$ ve $f(2\pi) = f(0) = f_0$)



$\mathcal{T}_l = \left\{ \begin{array}{l} \text{polinomis trigonomètrics de} \\ \text{grau } \leq l \end{array} \right\}$

esp. vectorial de dim $2l+1$ (així, $k=2l$)

Com a base, prenem els harmònics

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\cos 0x}, \quad \varphi_1(x) = \cos x, \quad \varphi_2(x) = \sin x, \quad \dots, \quad \varphi_{2l-1}(x) = \cos lx, \quad \varphi_{2l}(x) = \sin lx.$$

L'aproximació per mètode dels quadrats, ve donada pel sistema d'eqs. normals:

$$\begin{pmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & \dots & \langle \varphi_0, \varphi_{2l} \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \varphi_{2l}, \varphi_0 \rangle & \dots & \langle \varphi_{2l}, \varphi_{2l} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0/2 \\ a_1 \\ b_1 \\ \vdots \\ a_l \\ b_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \varphi_0, f \rangle \\ \vdots \\ \langle \varphi_{2l}, f \rangle \end{pmatrix}$$

Resulta que els harmònics són funcions ortogonals, i per tant la matriu és diagonal.

$$\langle \cos j_1 x, \cos j_2 x \rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } j_1 \neq j_2 \\ \frac{\pi+1}{2} & \text{si } 1 \leq j_1 = j_2 \leq l \\ \pi+1 & \text{si } j_1 = j_2 = 0. \end{cases}$$

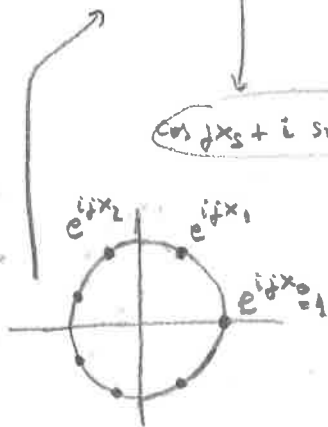
$$\langle \sin j_1 x, \sin j_2 x \rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } j_1 \neq j_2 \\ \frac{\pi+1}{2} & \text{si } 1 \leq j_1 = j_2 \leq l \end{cases}$$

(cal suposar $2l \leq n$)

$$\langle \cos j_1 x, \sin j_2 x \rangle = 0$$

Per deduir les fórmules, usem:

$$\sum_{s=0}^n e^{i \cdot j \cdot x_s} = \sum_{s=0}^n \left(e^{i \cdot \frac{2\pi j}{n+1}} \right)^s = \begin{cases} \frac{1 - e^{i \cdot 2\pi j}}{1 - e^{i \cdot \frac{2\pi j}{n+1}}} = 0, & \text{si } j \neq \frac{n+1}{2} \\ n+1, & \text{si } j = \frac{n+1}{2} \end{cases}$$



$$\cos jx_s + i \sin jx_s$$

$$\Rightarrow \sum_{s=0}^n \cos jx_s = \begin{cases} 0 & \text{si } j \neq \frac{n+1}{2} \\ n+1 & \text{si } j = \frac{n+1}{2} \end{cases}$$

$$\sum_{s=0}^n \sin jx_s = 0 \text{ sempre.}$$

llavors,

$$\langle \cos j_1 x, \cos j_2 x \rangle = \frac{1}{2} \sum_{s=0}^n [\cos(j_1 - j_2)x_s + \cos(j_1 + j_2)x_s] = \dots$$

$$\langle \sin j_1 x, \sin j_2 x \rangle = \frac{1}{2} \sum_{s=0}^n [\cos(j_1 - j_2)x_s - \cos(j_1 + j_2)x_s] = \dots$$

$$\langle \cos j_1 x, \sin j_2 x \rangle = \frac{1}{2} \sum_{s=0}^n [-\sin(j_1 - j_2)x_s + \sin(j_1 + j_2)x_s] = 0$$

usant $j_1 + j_2 \leq 2l < n+1$

Deduem els coeficients:

$$a_j = \frac{2}{n+1} \langle \cos jx, f \rangle = \frac{2}{n+1} \sum_{s=0}^n f_s \cos jx_s, \quad j \geq 0$$

$$b_j = \frac{2}{n+1} \langle \sin jx, f \rangle = \frac{2}{n+1} \sum_{s=0}^n f_s \sin jx_s, \quad j \geq 1$$

Obs: inclou $\frac{a_0}{2} = \frac{1}{n+1} \langle 1, f \rangle = \frac{1}{n+1} \sum_{s=0}^n f_s$ (mitjana de les f_s).

- si $2l = n$, haurem obtingut el polinomi interpolador trigonomètric.
- si $2l < n$, tenim l'aproximació trigonomètrica de grau l per mínims quadrats, amb deviació quadràtica mitjana, donada per:

$$\sum_{s=0}^n d_s^2 = \langle f, f \rangle - \langle p, p \rangle = \langle f, f \rangle - \frac{n+1}{2} \left[\frac{a_0^2}{2} + \sum_{j=1}^l (a_j^2 + b_j^2) \right] \rightsquigarrow \sqrt{\frac{1}{n+1} \sum_{s=0}^n d_s^2}$$

$$p = a_0 \varphi_0 + a_1 \varphi_1 + b_1 \varphi_2 + \dots + a_l \varphi_{2l-1} + b_l \varphi_{2l},$$

amb $\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle = n+1$, $\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle = \frac{n+1}{2}$ si $j \geq 1$.

Obs, Pel que hem vist, només podem fer

interpolació trigonomètrica si el nombre de punts $n+1$ és senar (cal $n=2l$).

Però si $n+1=2l$ és parell, també podem fer interpolació trigonomètrica amb

un polinomi del tipus: $p(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{j=1}^{l-1} (a_j \cos jx + b_j \sin jx) + \frac{a_l}{2} \cos lx$ (mateixa fórmula per als a_j, b_j).

① Usen els pesos moleculars dels sis òxids de nitrogen donats aquí per a calcular els pesos atòmics del nitrogen i l'oxigen.

NO: 30.006 N₂O: 44.013 NO₂: 46.006
 N₂O₃: 76.012 N₂O₄: 108.010 N₂O₅: 108.010 N₂O₆: 92.011

Escrivint $x = p.a.(N)$, $y = p.a.(O)$, tenim un sistema sobredeterminat:

$$\begin{cases} x+y = 30.006 \\ 2x+y = 44.013 \\ x+2y = 46.006 \\ 2x+3y = 76.012 \\ 2x+5y = 108.010 \\ 2x+4y = 92.011 \end{cases} \quad \text{és a dir} \quad A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = b, \quad \text{amb} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 2 & 5 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 30.006 \\ 44.013 \\ 46.006 \\ 76.012 \\ 108.010 \\ 92.011 \end{pmatrix}$$

Sistema d'eq. normals: $A^T A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = A^T b$, amb $A^T A = \begin{pmatrix} 18 & 29 \\ 29 & 56 \end{pmatrix}$, $A^T b = \begin{pmatrix} 716.104 \\ 1302.16 \end{pmatrix}$

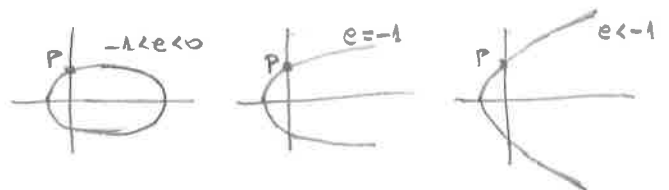
Resolent, obtenim $x = 14.0069$, $y = 15.9993$.

② Hom suposa que el cometa Tentax, descobert l'any 1968, és un objecte del Sistema Solar. En un cert sistema de coordenades polars (r, ϕ) , centrat en el Sol, s'han mesurat experimentalment les següents posicions del cometa:

r	2.70	2.00	1.61	1.20	1.02
ϕ	48°	67°	83°	108°	126°

Per les lleis de Kepler i menyssejant la perturbacions dels planetes, el planeta es mou en una cònica que, en les coordenades polars usades, té per equació $r = \frac{p}{1+e \cos \phi}$ on p és un paràmetre i e l'excentricitat de la trajectòria. Ajusteu per mínims quadrats els valors de p i e , a partir de les mesures fetes.

Cònica $r = \frac{p}{1+e \cos \phi}$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{si } |e| < 1 \rightarrow \text{el·lipse} \\ \text{si } |e| = 1 \rightarrow \text{paràbola} \\ \text{si } |e| > 1 \rightarrow \text{hipèrbole} \end{array} \right.$



Segons les dades, les posicions són:



$$\begin{aligned} x &= r \cos \phi \\ y &= r \sin \phi \end{aligned}$$

Reescrivim l'eq. de la cònica com una expressió lineal en p i e :

$$r = \frac{p}{1+e \cos \phi} \rightarrow r + r e \cos \phi = p \rightarrow p - r \cos \phi \cdot e = r$$

A partir de les dades, tenim

$-r \cos \phi$	-1.80665	-0.784462	-0.196210	0.370820	0.599541
r	2.70	2.00	1.61	1.20	1.02

Sistema sobredeterminat:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1.80665 \\ 1 & -0.784462 \\ 1 & -0.196210 \\ 1 & 0.370820 \\ 1 & 0.599541 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.70 \\ 2.00 \\ 1.61 \\ 1.20 \\ 1.02 \end{pmatrix}$$

Sistema d'eqs. normals:

$$A^T A = \begin{pmatrix} 5 & -1.81396 \\ -1.81396 & 4.41013 \end{pmatrix}, \quad A^T b = \begin{pmatrix} 8.53 \\ -5.70027 \end{pmatrix}$$

Solució: $p = 1.45405$
 $e = -0.694461 \rightarrow$ el·lipse

- 3 El nivell de l'aigua del mar del Nord està determinat principalment per l'amomenada marea M_2 , el període de la qual és al voltant de les 12 h i, per tant, suposem que té aproximadament la forma,

$$H(t) = h_0 + a_1 \sin \frac{2\pi}{12}t + a_2 \cos \frac{2\pi}{12}t, \text{ on } t \text{ es mesura en hores.}$$

S'han fet les següents mesures:

t	0	2	4	6	8	10	[h]
$H(t)$	1.0	1.6	1.4	0.6	0.2	0.8	[m]

- (a) Són ortogonals $1, \cos \frac{2\pi}{12}t$ i $\sin \frac{2\pi}{12}t$?
 (b) Ajusta $H(t)$ a aquestes mesures usant mínims quadrats.
 (c) Troba la desviació quadràtica mitjana.

(a) t | 0 2 4 6 8 10 (interval: $[0, 12]$)

$$\frac{2\pi}{12}t \quad \left| \quad \begin{array}{cccccc} 0 & \frac{\pi}{3} & \frac{2\pi}{3} & \pi & \frac{4\pi}{3} & \frac{5\pi}{3} \end{array} \right.$$

$$1 \quad \left| \quad \begin{array}{cccccc} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right.$$

$$\cos \frac{2\pi}{12}t \quad \left| \quad \begin{array}{cccccc} 1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \right.$$

$$\sin \frac{2\pi}{12}t \quad \left| \quad \begin{array}{cccccc} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{array} \right.$$

$$\left. \begin{array}{l} \langle 1, \cos \rangle = 0 \\ \langle 1, \sin \rangle = 0 \\ \langle \cos, \sin \rangle = 0 \end{array} \right\} \rightarrow$$

\Rightarrow són ortogonals.

[Nota: podem fer el canvi $x = \frac{2\pi}{12}t$ i usar les fórmules per a $1, \cos x, \sin x$].

(b) Eq. normals:
$$\begin{pmatrix} \langle 1, 1 \rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle \sin, \sin \rangle & 0 \\ 0 & 0 & \langle \cos, \cos \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1, H(t) \rangle \\ \langle \sin, H(t) \rangle \\ \langle \cos, H(t) \rangle \end{pmatrix}$$

Tenim $\langle 1, 1 \rangle = 6$ (nº punts).

$$\left. \begin{array}{l} \langle \sin, \sin \rangle = 3 \\ \langle \cos, \cos \rangle = 3 \end{array} \right\} \text{(nº punts/2)}$$

Calculem: $h_0 = \frac{\langle 1, H(t) \rangle}{\langle 1, 1 \rangle} = \frac{5.6}{6}, \quad a_1 = \frac{\langle \sin, H(t) \rangle}{\langle \sin, \sin \rangle} = \frac{\sqrt{3}}{3}, \quad a_2 = \frac{\langle \cos, H(t) \rangle}{\langle \cos, \cos \rangle} = \frac{0.8}{3}$

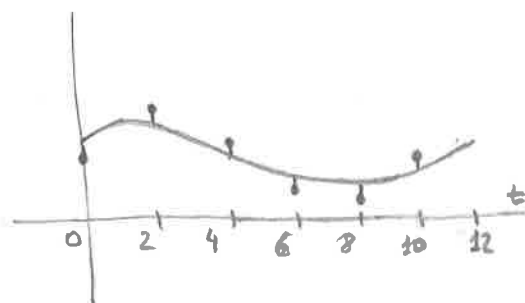
$$P(t) = \frac{5.6}{6} + \frac{1}{3} \left(\sqrt{3} \sin \frac{2\pi}{12}t + 0.8 \cos \frac{2\pi}{12}t \right)$$

(c) $d_i = H(t_i) - P(t_i), \quad i=0, \dots, 5$

$$\sum_{i=0}^5 d_i^2 = \langle H(t), H(t) \rangle - \frac{6}{2} \left(\frac{(2h_0)^2}{2} + a_1^2 + a_2^2 \right) = 0.12$$

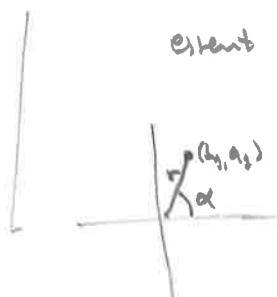
$$\langle H(t), H(t) \rangle = 6.56$$

Desv. quadràtica mitjana: $\sqrt{\frac{0.12}{6}} = \underline{\underline{0.141421}}$



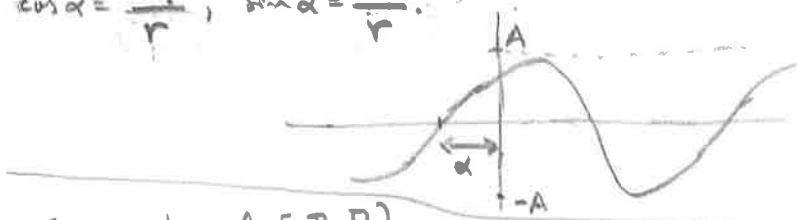
- ④ Trobem la millor aproximació per mínims quadrats als punts $(-\frac{\pi}{2}, 1), (0, 0), (\frac{\pi}{2}, \frac{1}{2}), (\pi, 1)$ i que sigui del tipus $f(\theta) = a + r \sin(\theta + \alpha)$ amb a, r reals i $\alpha \in [0, 2\pi)$.

Obs: sempre podem escriure $a_1 \cos \theta + b_1 \sin \theta = r \sin(\theta + \alpha)$



entant $r = \sqrt{a_1^2 + b_1^2}$ (amplitud)

$\alpha \in [0, 2\pi)$ amb $\cos \alpha = \frac{b_1}{r}$, $\sin \alpha = \frac{a_1}{r}$.
(fase)



Per a la taula

θ	$-\pi/2$	0	$\pi/2$	π	← interval $[-\pi, \pi]$
F	1	0	1/2	1	

busquem $f(\theta) = \frac{a_0}{2} + a_1 \cos \theta + b_1 \sin \theta$, millor aprox per mínims quadrats

$$\rightarrow \frac{a_0}{2} = \frac{\langle 1, F \rangle}{\langle 1, 1 \rangle} = \frac{1 + 0 + \frac{1}{2} + 1}{4} = \frac{5}{8}$$

$$a_1 = \frac{\langle \cos \theta, F \rangle}{\langle \cos \theta, \cos \theta \rangle} = \frac{\cos(-\frac{\pi}{2}) \cdot 1 + \cos 0 \cdot 0 + \cos \frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{2} + \cos \pi \cdot 1}{2} = -\frac{1}{2}$$

$$b_1 = \frac{\langle \sin \theta, F \rangle}{\langle \sin \theta, \sin \theta \rangle} = \frac{\sin(-\frac{\pi}{2}) \cdot 1 + \sin 0 \cdot 0 + \sin \frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{2} + \sin \pi \cdot 1}{2} = -\frac{1}{4}$$

Obtenim: $f(\theta) = \bar{a} + r \sin(\theta + \alpha)$

amb $\bar{a} = \frac{5}{8}$, $r = \sqrt{a_1^2 + b_1^2} = \frac{\sqrt{5}}{4} = 0,559017$

$$\cos \alpha = \frac{-1/4}{r}, \quad \sin \alpha = \frac{-1/2}{r}$$

$$\rightarrow \text{tg } \alpha = 2 \rightarrow \alpha = \begin{cases} \arctg 2 & (1^{\text{er}} \text{ quadrant}) \rightarrow \cos \alpha > 0, \sin \alpha > 0 \\ 0 & \\ \arctg 2 + \pi & (3^{\text{er}} \text{ quadrant}) \rightarrow \cos \alpha < 0, \sin \alpha < 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \alpha = 1,10715 + \pi = 4,24874$$

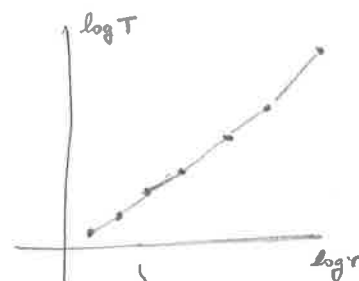
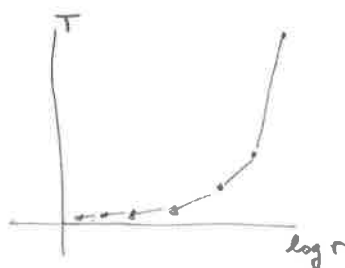
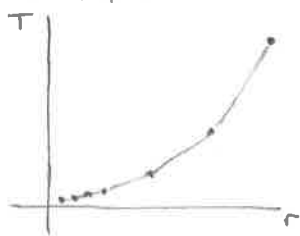
5 Per als set planetes més propers al Sol i usant mesures de Tycho Brahe, Kepler va obtenir una taula semblant a la següent:

r	60	110	150	230	480	1430	2870	milions de km
T	90	225	365	690	4330	10750	30650	dies

on r mesura la distància mitjana del planeta al Sol, i T el període orbital.

Usen aquests valors per a fer dibuixos de les gràfiques (r, T) , $(\log r, T)$, etc... fins que troben que els resultats es disposen aproximadament en una línia recta. En cas que sigui així, usen la taula per a fer el "millor ajust" i determinar una fórmula que relacioni r i T .

Algunes gràfiques:



aprox. sobre una línia recta

Construïm la taula:

$x = \log r$	4.09434	4.70048	5.01064	5.43808	6.65929	7.26543	7.96207
$y = \log T$	4.49981	5.44610	5.89990	6.53669	8.37332	9.28266	10.3304

Mitjançant la recta de regressió, buscarem una relació $y = a + bx$, és a dir $T = \alpha r^b$, amb $\alpha = e^a$.

Sistema d'eqs normals: $A^T A \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = A^T b$, amb $A^T A = \begin{pmatrix} 7 & 41.1303 \\ 41.1303 & 254.065 \end{pmatrix}$, $A^T b = \begin{pmatrix} 50.3389 \\ 314.446 \end{pmatrix}$

Solució: $\begin{cases} a = -1.65914 \\ b = 1.50626 \end{cases} \rightarrow \alpha = e^a = 0.190303$ } → tenim una fórmula $T = \alpha r^b$

De fet, la 3^a llei de Kepler estableix la fórmula $T = \text{const} \cdot r^{3/2}$, i hem obtingut un exponent $b \approx 3/2$.

6

(a) Donades les abscisses $x_0 = -2, x_1 = -1, x_2 = 0, x_3 = 1, x_4 = 2$, determineu a, b, c per tal que els polinomis

$$\phi_0(x) = 1, \quad \phi_1(x) = x + a, \quad \phi_2(x) = x^2 + bx + c,$$

siguin ortogonals respecte d'ells.

(b) Amb els polinomis $\phi_i(x)$ obtinguts, trobem c_0, c_1 i c_2 de manera que

$$p(x) = c_0 \phi_0(x) + c_1 \phi_1(x) + c_2 \phi_2(x)$$

sigui la millor aproximació per mínims quadrats de la taula

x	-2	-1	0	1	2
$f(x)$	0	0	3	4	0

(a)

$$0 = \langle \phi_0, \phi_1 \rangle = \langle 1, x \rangle + a \langle 1, 1 \rangle = 0 + 5a.$$

$$\rightarrow a = 0 \rightarrow \underline{\phi_1(x) = x}$$

$$0 = \langle \phi_0, \phi_2 \rangle = \langle 1, x^2 \rangle + b \langle 1, x \rangle + c \langle 1, 1 \rangle = 10 + 5c$$

$$0 = \langle \phi_1, \phi_2 \rangle = \langle x, x^2 \rangle + b \langle x, x \rangle + c \langle x, 1 \rangle = 10b$$

$$\rightarrow c = -2, b = 0 \rightarrow \underline{\phi_2(x) = x^2 - 2}$$

$\phi_1 = x$	-2	-1	0	1	2
$\phi_0 = 1$	1	1	1	1	1
x^2	4	1	0	1	4
$\phi_2 = x^2 - 2$	2	-1	-2	-1	2
f	0	0	3	4	0

* També podem usar la recurrència:

$$\phi_1(x) = (x - \beta_0) \phi_0(x) = x$$

$$\beta_0 = \frac{\langle x, \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0, \phi_0 \rangle} = \frac{\langle x, 1 \rangle}{\langle 1, 1 \rangle} = 0$$

$$\phi_2(x) = (x - \beta_1) \phi_1(x) - \sigma_1 \phi_0(x) = x^2 - 2$$

$$\beta_1 = \frac{\langle x, \phi_1 \rangle}{\langle \phi_1, \phi_1 \rangle} = \frac{\langle x, x \rangle}{\langle x, x \rangle} = 0, \quad \sigma_1 = \frac{\langle \phi_1, \phi_1 \rangle}{\langle \phi_0, \phi_0 \rangle} = \frac{\langle x, x \rangle}{\langle 1, 1 \rangle} = \frac{10}{5} = 2$$

(b) Sistema d'eqs. normals:

$$\begin{pmatrix} \langle \phi_0, \phi_0 \rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle \phi_1, \phi_1 \rangle & 0 \\ 0 & 0 & \langle \phi_2, \phi_2 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \phi_0, f \rangle \\ \langle \phi_1, f \rangle \\ \langle \phi_2, f \rangle \end{pmatrix}$$

$$c_0 = \frac{\langle \phi_0, f \rangle}{\langle \phi_0, \phi_0 \rangle} = \frac{7}{5}, \quad c_1 = \frac{\langle \phi_1, f \rangle}{\langle \phi_1, \phi_1 \rangle} = \frac{4}{10} = \frac{2}{5}, \quad c_2 = \frac{\langle \phi_2, f \rangle}{\langle \phi_2, \phi_2 \rangle} = \frac{-10}{14} = -\frac{5}{7}$$

$$p(x) = c_0 \phi_0(x) + c_1 \phi_1(x) + c_2 \phi_2(x) = \underline{\underline{\frac{7}{5} + \frac{2}{5}x - \frac{5}{7}(x^2 - 2)}}$$

7

La concentració a la sang d'un medicament, mesurat a intervals de 30 mn ve donada per la taula següent,

temps [min]	30	60	90	120
concentració [mg/l]	60.6	36.8	22.3	13.6

(a) Assumint que la concentració a la sang en un instant t es pot modelar per un procés de decaïment exponencial,

$$C_t = C_0 e^{-Kt}$$

ajusten els paràmetres C_0 i K per mínims quadrats.

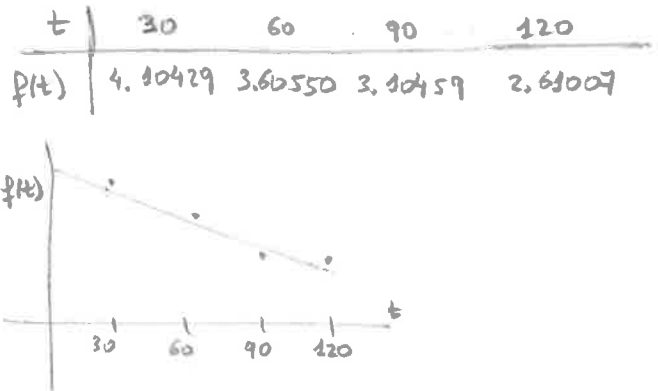
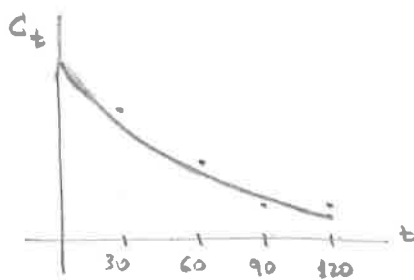
(b) Sabent que la vida mitjana d'una substància es defineix com el temps necessari per tal que la seva concentració disminueixi a la meitat, calculen la vida mitjana d'aquesta substància.

(c) Calculen una base de polinomis ortogonals fins a grau 2 usant els temps donats a la taula.

(a) Prenent logaritmes,

$$f(t) = \ln C_t = \ln C_0 - Kt = A + Bt, \text{ essent } A = \ln C_0, B = -K.$$

Ajustem A i B per mínims quadrats, prenent la base $\varphi_0(t) = 1, \varphi_1(t) = t$ (recta de regressió).



Sistema d'eps. normals:

$$\begin{pmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & \langle \varphi_0, \varphi_1 \rangle \\ \langle \varphi_0, \varphi_1 \rangle & \langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \varphi_0, f \rangle \\ \langle \varphi_1, f \rangle \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 4 & 300 \\ 300 & 27000 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 13.4244 \\ 932.080 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow A &= 4.60201 & \rightarrow \left[\begin{aligned} C_0 &= e^A = 99.6844 \text{ mg/l (concentr. inicial)} \\ K &= -B = 0.0166120 \text{ min}^{-1} \end{aligned} \right] \\ B &= -0.0166120 \end{aligned}$$

(b) Busquem t_m tal que $C_{t_m} = C_0/2 \rightarrow e^{-Kt_m} = \frac{1}{2} \rightarrow t_m = \frac{\ln 2}{K} = 41.7258 \text{ mn.}$

(c) Usem la recurrència:

$$\begin{cases} \varphi_0(t) = 1 \\ \varphi_1(t) = (t - \beta_0)\varphi_0(t) = t - 75 \\ \varphi_2(t) = (t - \beta_1)\varphi_1(t) - \sigma_1\varphi_0(t) = (t - 75)^2 - 1125 = t^2 - 150t + 4500 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \frac{\langle t, \varphi_0^2 \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{300}{4} = 75 \\ \beta_1 &= \frac{\langle t, \varphi_1^2 \rangle}{\langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle} = \frac{337500}{4500} = 75 \\ \sigma_1 &= \frac{\langle \varphi_0, \varphi_1 \rangle}{\langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle} = \frac{4500}{4} = 1125 \end{aligned}$$