Método de mínimos cuadrados

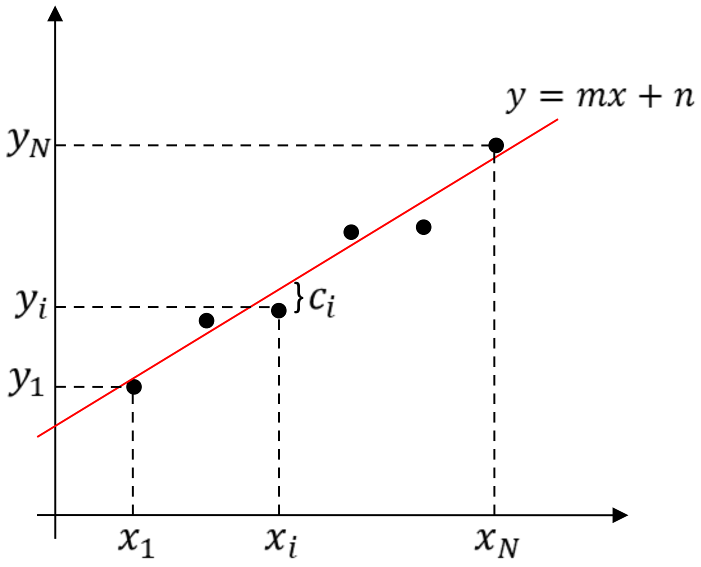
Ajuste lineal por mínimos cuadrados

Ajuste lineal por mínimos cuadrados

Dados N pares de medidas: $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$

y la recta: $y = mx + n$

buscamos encontrar los coficientes m y n que mejor aproximan la recta a la serie de datos.



Los coeficientes c_i (con i de 1 a N) representan la diferencia entre y_i y el valor que la recta toma en x_i. Es decir,

$$c_i = y_i - mx_i - n$$

Consideramos que la mejor aproximación está dada por los valores de m y n que minimizan la suma cuadrática de los c_i, esto es, mimimizar la función:

$$f(m,n) = \sum_{i=1}^{N} c_i^2 = \sum_{i=1}^{N} (y_i - mx_i - n)^2$$

Ajuste lineal por mínimos cuadrados

Para minimizar $f(m,n)$, igualamos sus derivadas a 0. Como es una función de dos variable, consideramos sus derivadas parciales. Esto es, derivamos f dos veces; primero considerando m como única variable y segundo, considerando n como única variable:

$$\frac{\partial f}{\partial m} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{N}(y_i - mx_i - n)^2}{\partial m} = \sum_{i=1}^{N} 2(y_i - mx_i - n)(-x_i) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial n} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{N}(y_i - mx_i - n)^2}{\partial n} = \sum_{i=1}^{N} 2(y_i - mx_i - n)(-1) = 0$$

Operando cuidadosamente se obtiene:

$$\boxed{m = \frac{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2}} \qquad \boxed{n = \bar{y} - m\bar{x}}$$

donde $\bar{x}$ y $\bar{y}$ son los promedios calculados con las series de datos.

Incertidumbre en los coeficientes

Para estimar las incertidumbres en los coeficientes m y n, asumimos lo siguiente:

- Los x_i no tienen incertidumbre;
- Los y_i tienen todos la misma incertidumbre que estimamos como la desviación estándar σ_c de los c_i.

Las incertidumbres en los parámetros las calculamos con la ecuación cuadrática de propagación de incertidumbres:

$$\delta m = \sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial m}{\partial y_i}\delta y_i\right)^2} = \sigma_c \sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial m}{\partial y_i}\right)^2} \longrightarrow \boxed{\delta m = \frac{\sigma_c}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2}}}$$

$$\delta n = \sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial n}{\partial y_i}\delta y_i\right)^2} = \sigma_c \sqrt{\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial n}{\partial y_i}\right)^2} \longrightarrow \boxed{\delta n = \frac{\sigma_c}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2}}\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} {x_i}^2}{N}}}$$

Coeficiente de correlación lineal

$$R = \frac{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2 (y_i - \bar{y})^2}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \bar{y})^2}}$$

¿Qué tan bueno es el ajuste?

- $R^2 = 1$ Correlación total.
- $R^2 = 0$ No hay correlación.

Coeficiente de correlación lineal

Ver tutorial de Google Sheets:

https://support.google.com/docs/answer/3094249?hl=es-419

¿Qué sucede si la función de ajuste no es lineal?

1) Linealización.

¿Qué sucede si la función de ajuste no es lineal?

1) Linealización. Pero, no siempre es posible

¿Qué sucede si la función de ajuste no es lineal?

1) Linealización. Pero, no siempre es posible

2) Se puede aplicar siempre el método de mínimos cuadrados.

¿Qué sucede si la función de ajuste no es lineal?

1) Linealización. Pero, no siempre es posible

2) Se puede aplicar siempre el método de mínimos cuadrados.

Pero, el sistema de ecuaciones al que se llega es no-lineal y no se puede resolver de forma analítica.

1) Linealización

- En ocasiones, podemos transformar una ecuación no lineal, en una lineal.
- No hay un método para determinar cuándo es posible ni una *receta* de cómo hacerlo.
- Observando con detenimiento la función no lineal a la que nos estemos enfrentando, es como podríamos identificar una manera de convertirla en lineal.

1) Linealización

Ejemplo:

Para una masa de gas determina experimentales los valores de la presión $\{P_1, P_2, \ldots, P_N\}$, correspondientes a diversos valores del volumen $\{V_1, V_2, \ldots, V_N\}$. De acuerdo con los principios termodinámicos, debe existir una relación entre las variables en la forma:

$$P \cdot V^{\gamma} = C$$

donde γ y C son constantes a determinar.

¿Podría hallar dichas constantes a partir del método antes visto?
Explique cómo obtiene las constantes γ y C a partir de los parámetros de la recta de ajuste.

1) Linealización

Ejemplo:

En una determinada experiencia se mide una determinada magnitud *W* al variar cierta variable de control *m*. Se obtiene el conjunto de medidas $\{(m_{1,}W_1),(m_{2,}W_2),...(m_{N,}W_N)\}$.
Si la relación funcional entre *m* y *W* está dada por la siguiente ecuación:

$$W^3=(1+\alpha)\,e^{\frac{-\beta}{m}}$$

donde α y β son constantes a determinar.
¿Podría hallar estas constantes con el método antes descrito?
Explique.

1) Linealización

Ejemplo:

En una determinada experiencia se mide una determinada magnitud W al variar cierta variable de control m. Se obtiene el conjunto de medidas $\{(m_1, W_1), (m_2, W_2), \ldots (m_N, W_N)\}$.
Si la relación funcional entre m y W está dada por la siguiente ecuación:

$$W = \frac{\alpha}{1+m} - \beta$$

donde α y β son constantes a determinar.
¿Podría hallar estas constantes con el método antes descrito?
Explique.

1) Linealización

Ejemplo:

En una determinada experiencia se mide una determinada magnitud *W* al variar cierta variable de control *m*. Se obtiene el conjunto de medidas $\{(m_1, W_1), (m_2, W_2), \ldots (m_N, W_N)\}$.
Si la relación funcional entre *m* y *W* está dada por la siguiente ecuación:

$$W = \alpha \cdot \sin(3 \cdot m) + \frac{\alpha}{\beta}$$

donde α y β son constantes a determinar.
¿Podría hallar estas constantes con el método antes descrito?
Explique.

1) Linealización

Ejemplo:

En una determinada experiencia se mide una determinada magnitud *W* al variar cierta variable de control *m*. Se obtiene el conjunto de medidas $\{(m_{1,}W_1),(m_{2,}W_2),...(m_{N,}W_N)\}$.
Si la relación funcional entre *m* y *W* está dada por la siguiente ecuación:

$$W = \alpha\, m^2 + \beta\, m - 5$$

donde α y β son constantes a determinar.
¿Podría hallar estas constantes con el método antes descrito?
Explique.

2) Funciones no linealizables

Consideremos que la relación funcional entre *x* e *y* está dada por una función *f* con *K* parámetros $\{a_1, a_2, \ldots, a_K\}$, a determinar mediante el ajuste de los datos experimentales por el método de mínimos cuadrados:

$$y = f_{a_1, a_2, \ldots, a_K}(x)$$

2) Funciones no linealizables

Como resultado del experimento, recabamos la tabla de datos:

x	y
x_1	$y1$
x_2	y_2
$\vdots$	$\vdots$
x_N	y_N

2) Funciones no linealizables

Para cada valor de la variable de control (*x*), calculamos cuál es el valor funcional del modelo. Dicha operación queda expresada en función de los *K* parámetros que buscamos determinar ($a_1, a_2, \ldots, a_K$).

x	y	$f_{a1,a2,\ldots,aN}(x)$
x_1	$y1$	$f_{a1,a2,\ldots,aN}(x_1)$
x_2	y_2	$f_{a1,a2\ldots,aN}(x_2)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_N	y_N	$f_{a1,a2\ldots,aN}(x_N)$

2) Funciones no linealizables

Calculamos la distancia cuadrática total (*S*) entre los valores funcionales en cada valor ($x_1, x_2, \ldots, x_N$) y los valores medidos ($y_1, y_2, \ldots, y_N$):

$$S(a_1, a_2, \ldots, a_K) = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - f_{a_1, a_2, \ldots, a_K}(x_i) \right)^2$$

Notar que *S* es función de los coeficientes incógnita: $a_1, a_2, \ldots, a_K$.

2) Funciones no linealizables

Debemos minimizar *S(a1,a2, ... , a_N)*, es decir, debemos determinar el valor de los coeficientes que hacen que *S* sea mínima. Esto se hace tomando la derivada *parcial* respecto de cada coeficiente e igualando a cero:

$$\frac{\partial S(a_1, a_2, \ldots, a_K)}{\partial a_1} = 0$$

$$\frac{\partial S(a_1, a_2, \ldots, a_K)}{\partial a_2} = 0$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial S(a_1, a_2, \ldots, a_K)}{\partial a_K} = 0$$

2) Funciones no linealizables

$$\frac{\partial S(a_1, a_2, \ldots, a_K)}{\partial a_1} = 0$$

$$\frac{\partial S(a_1, a_2, \ldots, a_K)}{\partial a_2} = 0$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial S(a_1, a_2, \ldots, a_K)}{\partial a_K} = 0$$

Así obtenemos un sistema de *K* ecuaciones con *K* incógnitas (*a1,a2, ... , a_N*).
En general, el sistema que se obtiene es no lineal y solo se puede resolver con algoritmos computacionales.

2) Funciones no linealizables

Ejercicio:

Suponga que el modelo físico del sistema sobre el que realizó mediciones (y obtuvo las medidas $\{(x_1,y_1), (x_2,y_2), \ldots, (x_N,y_N)\}$) responde a una función cuadrática (polinomio de grado 2).

¿Cuántos coeficientes debe determinar? Es decir, ¿cuánto vale K en este caso?

¿Cuál es la expresión de S y qué sistema de ecuaciones obtiene con el método de mínimos cuadrados?

2) Funciones no linealizables

Ejemplo:

Se mide la posición de un cuerpo en función del tiempo. El movimiento es en una dimensión y con aceleración constante *a*. Se obtiene el conjunto de medidas $\{(t_1, x_1), (t_2, x_2), \ldots (t_N, x_N)\}$.
La relación funcional entre *t* y *x* está dada por la siguiente ecuación:

$$x = \frac{a}{2} t^2 + v_0 t + x_0$$

donde *a*, v_0 y x_0 son constantes a determinar.
¿Cómo determinaría dichas constantes a partir de las mediciones experimentales recabadas? Explique.