Método de los Mínimos Cuadrados (lineal)

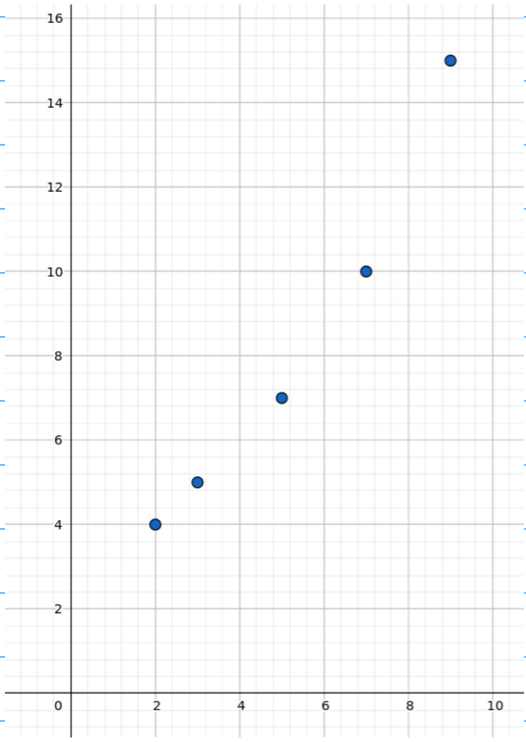
Datos: $P_1 = (x_1, y_1)$

$P_2 = (x_2, y_2)$

$\vdots$

$P_n = (x_n, y_n)$

$\underline{n}$ puntos del plano



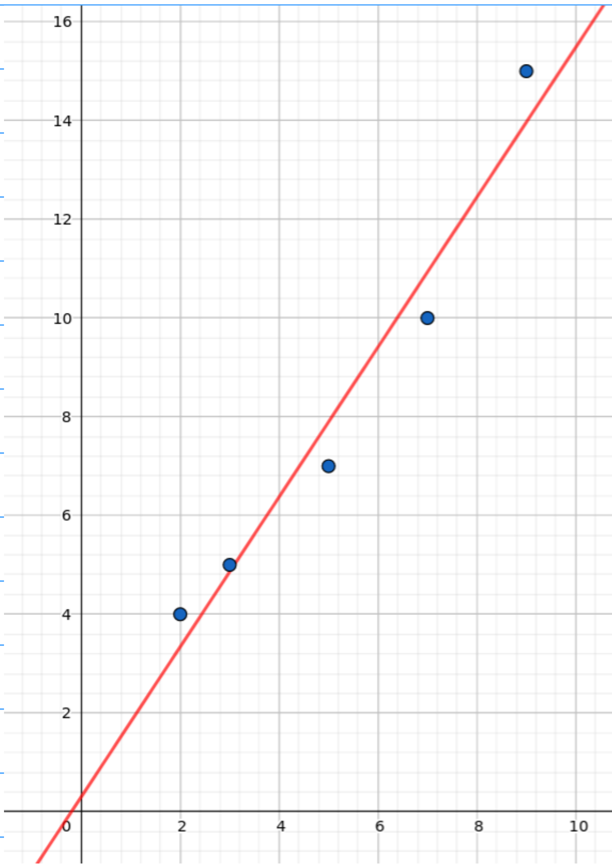
Supongo: $x_1, \dots, x_n$ no se repiten

Buscamos:

La recta que "mejor se ajusta" a los datos

("más cerca" de pasar por $P_1, \dots, P_n$)

$$r: \quad y = \underline{a}\, x + \underline{b}$$



Queremos los valores de $\underline{a}$ y $\underline{b}$ para que las aproximaciones

$$y_i \approx a x_i + b$$

sean las "mejores posibles" para $i = 1, \dots, n$

Interpretación : $\underline{y}$ variable que depende de $\underline{x}$

P. ej : x = cantidad nutriente | x = cantidad reactivo
y = población | y = cantidad producto

$$\left.\begin{array}{l} P_1 = (x_1, y_1) \\ \vdots \\ P_n = (x_n, y_n) \end{array}\right\} \text{ medidas de } (x,y) \longrightarrow$$

x	y
x_1	y_1
$\vdots$	$\vdots$
x_n	y_n

Queremos ver si $y \approx ax+b$?

Para qué valores de a, b ?

$$\begin{matrix} P_1 & & P_n \\ \shortparallel & & \shortparallel \\ (x_1, y_1) & , \ldots , & (x_n, y_n) \end{matrix} \leftarrow \text{constantes}$$

$x_1, \ldots, x_n$ no se repiten

$a, b \leftarrow$ variables

Caso $\underline{n=2}$: hay una única recta que pasa por P_1 y P_2

$$\left\{ \begin{array}{l} \underset{=}{a} x_1 + \underset{=}{b} = y_1 \\ \underset{=}{a} x_2 + \underset{=}{b} = y_2 \end{array} \right. \quad \text{es C.D.}$$

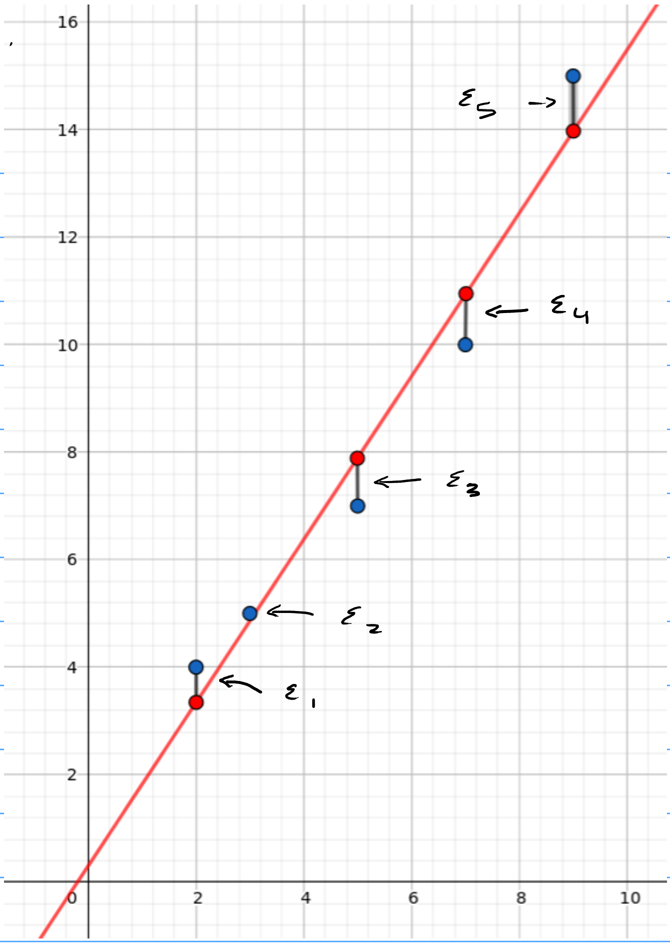
$\underline{\text{Caso } n \geq 3}$: A menos que estén alineados, no hay recta que pase por $P_1, \ldots, P_n$.

$$\left\{ \begin{array}{l} a x_1 + b = y_1 \\ \quad \vdots \\ a x_n + b = y_n \end{array} \right. \quad \text{es } \underline{\text{Incompatible}} \quad (\text{en general})$$

Errores :

$$\left. \begin{array}{l} \varepsilon_1 = y_1 - a x_1 - b \\ \vdots \\ \varepsilon_n = y_n - a x_n - b \end{array} \right\} \rightsquigarrow \text{errores de aproximar } y_i \text{ por } a x_i + b$$

para $i = 1, \ldots, n$.



$\varepsilon_i = y_i - a x_i - b$

$|\varepsilon_i|$ = longitud de cada segmento vertical, de P_i hasta la recta $y = ax + b$.

$\varepsilon_i = y_i - a x_i - b$ para $i = 1, \ldots, n$

Se quiere "minimizar todos": $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$

Una idea: minimizar $|\varepsilon_1| + \cdots + |\varepsilon_n|$ ✗

no es derivable respecto a a, b.

Mínimos Cuadrados: minimizar $\varepsilon_1^2 + \cdots + \varepsilon_n^2$

$$E(a,b) = \sum \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a x_i - b)^2$$

suma de
$i = 1, \ldots, n$

(escribiremos $\sum$ para $\sum\limits_{i=1}^{n}$)

Minimizar $E(a,b) = \sum (y_i - a x_i - b)^2$

Si E tiene mínimo absoluto en (a_0, b_0)

$\Rightarrow$ $y = a_0 x + b_0$ recta que mejor se ajusta a $P_1, \ldots, P_n$

$E(a_0, b_0)$ chico $\longleftrightarrow$ aprox. buena.

$$E(a,b) = \sum (y_i - a x_i - b)^2$$

Busco los puntos críticos:

$$\frac{\partial E}{\partial a}(a,b) = \sum 2(y_i - a x_i - b)\cdot(-x_i) = -2 \sum (y_i - a x_i - b)\, x_i$$

$$\frac{\partial E}{\partial b}(a,b) = \sum 2(y_i - a x_i - b)\cdot(-1) = -2 \sum (y_i - a x_i - b)$$

Agrupo en coeficientes de $\underline{\underline{a}}$ y $\underline{\underline{b}}$:

$$\frac{\partial E}{\partial a}(a,b) = -2 \sum (y_i x_i - a x_i^2 - b x_i)$$

$$= -2 \left(\sum y_i x_i - \sum a x_i^2 - \sum b x_i \right)$$

$$= -2 \left(\sum y_i x_i - \left(\sum x_i^2\right) \underline{\underline{a}} - \left(\sum x_i\right) \underline{\underline{b}} \right)$$

$$\frac{\partial E}{\partial b}(a,b) = -2 \left(\sum y_i - \left(\sum x_i\right) a - \underbrace{\sum b}_{nb} \right)$$

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a}(a,b) &= -2\left(\sum x_i y_i - \left(\sum x_i^2\right) \underset{=}{a} - \left(\sum x_i\right) \underset{=}{b} \right) \\ \frac{\partial E}{\partial b}(a,b) &= -2\left(\sum y_i - \left(\sum x_i\right) \underset{=}{a} - n \underset{=}{b} \right) \end{aligned}}$$

P. Críticos: $\begin{cases} \left(\sum x_i^2\right) a + \left(\sum x_i\right) b = \sum x_i y_i \\ \left(\sum x_i\right) a + n b = \sum y_i \end{cases}$

Teorema: Si $x_1, \dots, x_n$ no se repiten $\Rightarrow$ sistema es C.D.

Osea: $\begin{pmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{pmatrix}$ es invertible.

$\Rightarrow$ E tiene un único punto crítico

Teorema 2: E tiene mínimo absoluto, (y se dá en el punto crítico)

Idea: Si $a \to \pm\infty$ ó $b \to \pm\infty$ $\rightsquigarrow$ $E(a,b) \to +\infty$

$\rightsquigarrow$ hay mínimo.

Conclusión: de acuerdo al método de los mínimos cuadrados, la recta que mejor ajusta los datos $P_1 = (x_1, y_1), \ldots, P_n = (x_n, y_n)$ es

$y = ax + b$ donde (a, b) es la solución de:

$$\boxed{\begin{cases} \left(\sum x_i^2\right) a + \left(\sum x_i\right) b = \sum x_i y_i \\ \left(\sum x_i\right) a + n\, b = \sum y_i \end{cases}}$$

Ejemplo:

X	Y
2	4
3	5
5	7
7	10
9	15

$P_1 = (2, 4)$ $(n = 5)$

$P_2 = (3, 5)$

$P_3 = (5, 7)$

$P_4 = (7, 10)$

$P_5 = (9, 15)$

Preciso calcular $\sum x_i$, $\sum x_i^2$, $\sum y_i$, $\sum x_i y_i$

$$\rightsquigarrow \begin{cases} \left(\sum x_i^2\right) a + \left(\sum x_i\right) b = \sum x_i y_i \\ \left(\sum x_i\right) a + n\, b = \sum y_i \end{cases}$$

X	Y	X^2	XY	
2	4	4	8	1
3	5	9	15	1
5	7	25	35	1
7	10	49	70	1
9	15	81	135	1
26	41	168	263	5
$\sum x_i$	$\sum y_i$	$\sum x_i^2$	$\sum x_i y_i$	n

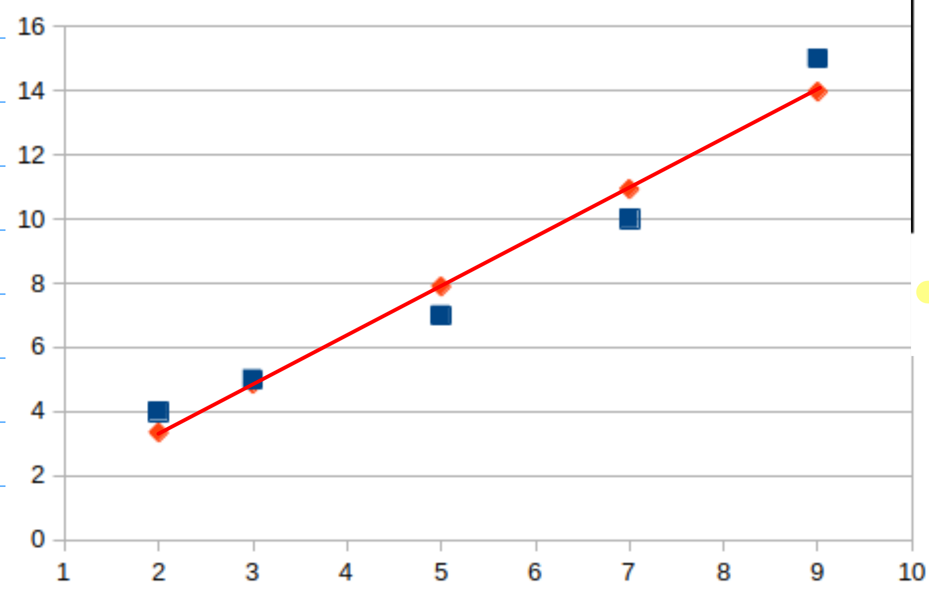
$$\rightsquigarrow \begin{cases} 168a + 26b = 263 \\ 26a + 5b = 41 \end{cases}$$

a	1.518292683
b	0.304878049

$$\boxed{\begin{array}{l} a \simeq 1,52 \\ b \simeq 0,3 \end{array}}$$

Recta: $\boxed{y = 1,52x + 0,3}$

X	Y	aX+b	error	error^2
2	4	3.3414634146	0.658536585	0.433670434
3	5	4.8597560976	0.140243902	0.019668352
5	7	7.8963414634	-0.896341463	0.803428019
7	10	10.932926829	-0.932926829	0.870352469
9	15	13.969512195	1.030487805	1.061905116

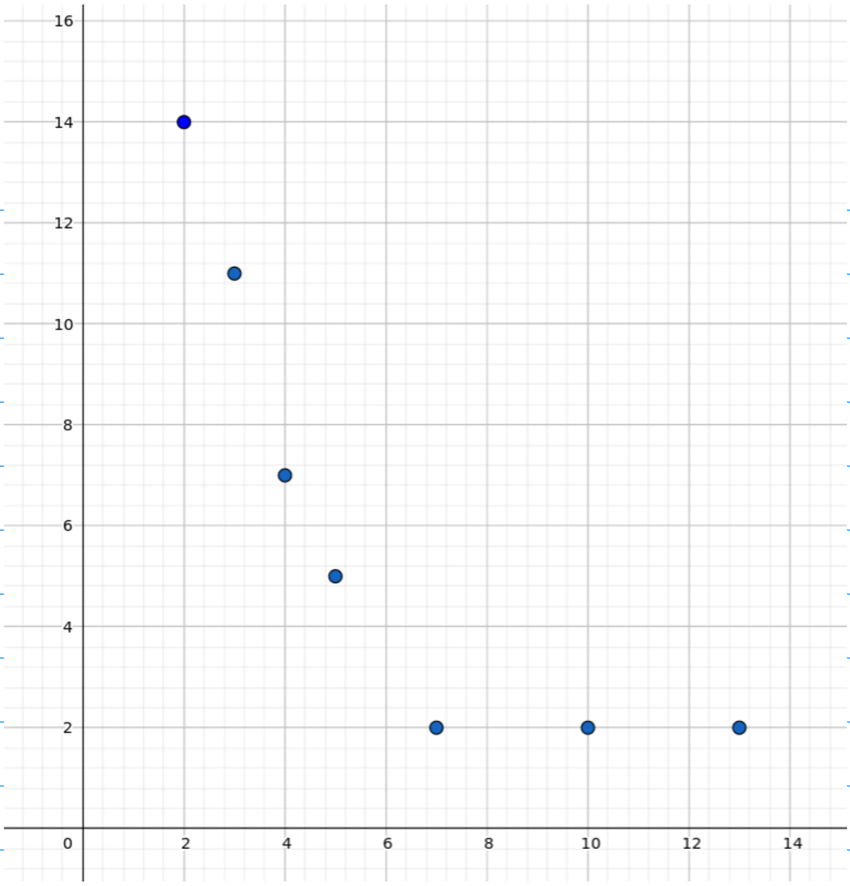


3.18902439

mínimo de E

Ejemplo :

X	Y
2	14
3	11
4	7
5	5
7	2
10	2
13	2



X	Y	X^2	XY	
2	14	4	28	1
3	11	9	33	1
4	7	16	28	1
5	5	25	25	1
7	2	49	14	1
10	2	100	20	1
13	2	169	26	1
44	43	372	174	7

$$\begin{cases} 372a + 44b = 174 \\ 44a + 7b = 43 \end{cases}$$

a	-1.008982036
b	12.48502994

$$\boxed{\begin{array}{l} a \approx -1{,}01 \\ b \approx 12{,}48 \end{array}}$$

Recta obtenida :

$$\boxed{y = -1{,}01x + 12{,}48}$$

X	Y	aX+b	error	error^2
2	14	10.467065868	3.5329341317	12.48162358
3	11	9.4580838323	1.5419161677	2.377505468
4	7	8.4491017964	-1.449101796	2.099896016
5	5	7.4401197605	-2.44011976	5.954184445
7	2	5.4221556886	-3.422155689	11.71114956
10	2	2.3952095808	-0.395209581	0.156190613
13	2	-0.631736527	2.6317365269	6.926037147

41.70658683 ← Min. de E.