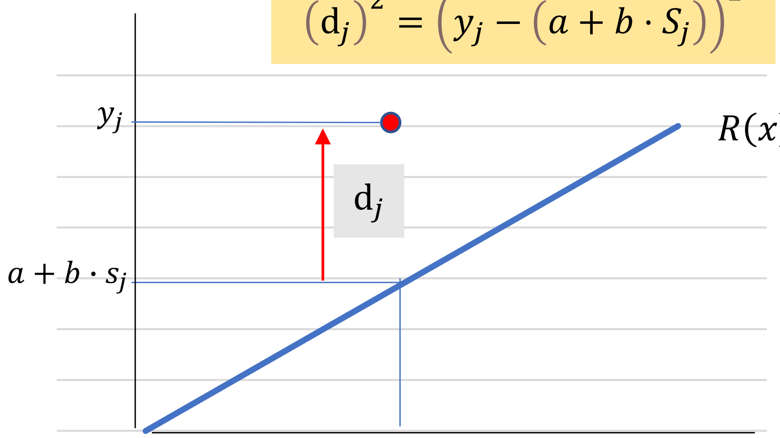
AJUSTE POR MÍNIMOS CUADRADOS (Cálculo científico)

El **ajuste por mínimos cuadrados** en un procedimiento que pertenece al análisis numérico. Así, **se parte** de un **conjunto de valores (x,y)** para intentar **determinar la función continua que se aproxime mejor**, es decir, que se ajuste a los datos propuestos (línea de regresión).

Para obtener la expresión general, nos basaremos en la ecuación de una recta:
$y = mx + b$
donde m es la pendiente y b el punto de corte con el eje de ordenadas.

$$(\mathrm{d}_j)^2 = \left(y_j - (a + b \cdot S_j)\right)^2$$



$R(x) = a + bx$

d_j : distancia cuyo cuadrado se minimiza, es decir, la distancia entre el punto y su correspondiente valor en la función de aproximación

Figura 1: Representación de d_j

COMENTARIO SOBRE DERIVADAS PARCIALES

Al derivar una **función** que depende de **varias variables**, hemos de utilizar **DERIVADAS PARCIALES**, es decir, derivaremos la función respecto a cada variable de forma independiente, tomando las otras como constantes.

Ejemplo: $f(x, y, z) = x^2 + 2y - z$

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2x + 0 + 0 = 2x$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = 0 + 2 - 0 = 2$$

$$\frac{\partial f}{\partial z} = 0 + 0 - 1 = -1$$

M2/2020

AJUSTE POR MÍNIMOS CUADRADOS: CASO LINEAL (Recta de regresión)

Tras lo visto anteriormente, **definimos** una **FUNCIÓN** de **DOS VARIABLES**:

$$f(a,b) = \sum_{j=1}^{n} d_j^2 = \sum_{j=1}^{n} (y_j - (a + b \cdot s_j))^2$$

$\boldsymbol{n}$ es el número de puntos que nos dan

- **CÁLCULO DEL MÍNIMO DE $\boldsymbol{f(a,b)}$**:

Derivamos e igualamos a 0 (como en nuestro caso es una parábola, solo hay un punto donde esto se cumple, por lo que luego verificaremos que es un MÍNIMO).

1 $$\frac{\partial f}{\partial a} = 2 \sum_{j=1}^{n} [(y_j - (a + b \cdot s_j))(-1)] = 0$$

2 $$\frac{\partial f}{\partial b} = 2 \sum_{j=1}^{n} [(y_j - (a + b \cdot s_j))(-s_j)] = 0$$

Como queremos despejar a y b, **extraemos todas las componentes que no dependan de ellas**, como, por ejemplo, la y_j:

1 $$\sum_{j=1}^{n} (a + b \cdot s_j) = \sum_{j=1}^{n} y_j \rightarrow \boxed{\sum_{j=1}^{n} a + b \sum_{j=1}^{n} s_j = \sum_{j=1}^{n} y_j}$$

2 $$\boxed{\sum_{j=1}^{n} [(a + b \cdot s_j)(s_j)] = \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j)}$$

El 2 de la expresión anterior se ha simplificado

Ahora, **extraemos las constantes**:

- La $\boldsymbol{a}$ se repite n → $(a_i + a_{i+1} + \cdots + a_n)$
- La $\boldsymbol{b}$ del sumatorio, como en la expresión $b \sum_{j=1}^{n} s_j$

Por lo que las **expresiones resultantes** son:

1 $$n \cdot a + b \sum_{j=1}^{n} s_j = \sum_{j=1}^{n} y_j$$

2 $$a \sum_{j=1}^{n} s_j + b \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 = \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j)$$

Así, hemos conseguido el siguiente **SISTEMA DE ECUACIONES**:

$$\begin{cases} ① \quad n \cdot a + b\sum_{j=1}^{n} s_j = \sum_{j=1}^{n} y_j \\ ② \quad a\sum_{j=1}^{n} s_j + b\sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 = \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j) \end{cases}$$

Sistema con:
DOS ECUACIONES y DOS INCÓGNITAS

Debemos calcular a y b, por lo que **simplificamos las expresiones** para que nos sea más fácil operar. De esta manera:

$$SX \equiv \sum_{j=1}^{n} s_j \qquad SY \equiv \sum_{j=1}^{n} y_j \qquad SX2 \equiv \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 \qquad SXY \equiv \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j)$$

Por lo tanto, el **sistema de ecuaciones** queda de la siguiente manera:

$$\begin{cases} n \cdot a + b \cdot SX = SY \\ a \cdot SX + b \cdot SX2 = SXY \end{cases}$$

Resolveremeos el sistema por la **REGLA DE CRAMER**, aunque se puede resolver por cualquier medio conocido.
El primer paso es **escribir el sistema de forma matricial**:

$$A \cdot X = F$$

$$A = \begin{pmatrix} n & SX \\ SX & SX2 \end{pmatrix} \qquad X = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \qquad F = \begin{pmatrix} SY \\ SXY \end{pmatrix}$$

A= lo que multiplica a la ecuación
X= incógnitas
F= términos independientes

Calculamos el **determinante (D)** de A:

$$D = \begin{vmatrix} n & SX \\ SX & SX2 \end{vmatrix} = n \cdot SX2 - (SX)^2$$

Una vez hemos hallado el determinante **D**, **CALCULAMOS LAS INCÓGNITAS** $\boldsymbol{a}$ y $\boldsymbol{b}$:

$$a = \frac{\begin{vmatrix} SY & SX \\ SXY & SX2 \end{vmatrix}}{D} = \frac{1}{D}(SY \cdot SX2 - SX \cdot SXY)$$

$$b = \frac{\begin{vmatrix} n & SY \\ SX & SXY \end{vmatrix}}{D} = \frac{1}{D}(n \cdot SXY - SX \cdot SY)$$

En el **numerador** ponemos el **determinante D**, pero **sustituyendo los términos independientes** $\begin{pmatrix} SY \\ SXY \end{pmatrix}$ en: la primera columna en el caso de a, y en la segunda columna en el caso de b.

Una vez halladas las incógnitas, **recuperamos las componentes que habíamos simplificado** con los términos:

$$SX \equiv \sum_{j=1}^{n} s_j \qquad SY \equiv \sum_{j=1}^{n} y_j \qquad SX2 \equiv \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 \qquad SXY \equiv \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j)$$

$$\boldsymbol{a} = \frac{1}{D}(SY \cdot SX2 - SX \cdot SXY) = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_j \cdot \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - \sum_{j=1}^{n} s_j \cdot \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j)}{n \cdot \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - (\sum_{j=1}^{n} s_j)^2}$$

$$\boldsymbol{b} = \frac{1}{D}(n \cdot SXY - SX \cdot SY) = \frac{n \cdot \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j) - \sum_{j=1}^{n} s_j \cdot \sum_{j=1}^{n} y_j}{n \cdot \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - (\sum_{j=1}^{n} s_j)^2}$$

Tras obtenerlas, **sustituimos los valores en la ecuación general** de la recta y **obtenemos** la siguiente **RECTA DE REGRESIÓN:**

$$R(x) = a + b \cdot x = \frac{1}{D}(SY \cdot SX2 - SX \cdot SXY) + \frac{1}{D}(n \cdot SXY - SX \cdot SY) \cdot x$$

Es decir:

$$R(x) = a + b \cdot x = \frac{\sum_{j=1}^{n} y_j \cdot \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - \sum_{j=1}^{n} s_j \cdot \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j)}{n \cdot \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - (\sum_{j=1}^{n} s_j)^2} + \frac{n \cdot \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j) - \sum_{j=1}^{n} s_j \cdot \sum_{j=1}^{n} y_j}{n \cdot \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - (\sum_{j=1}^{n} s_j)^2} \cdot x$$

EJERCICIO DE ASIMILACIÓN: Realizar un ALGORITMO PARA EL CÁLCULO DE LOS COEFICIENTES DE LA RECTA DE REGRESIÓN Y LOS VALORES QUE TOMA EN UNA SERIE DE PUNTOS DADOS:

- Un **vector s** de **n componentes** que contiene las **ABSCISAS** de la nube de puntos
- Un **vector y** de **n componentes** que contiene las **ORDENADAS** de la nube de puntos
- Una **variable L**
- Una **variable p**

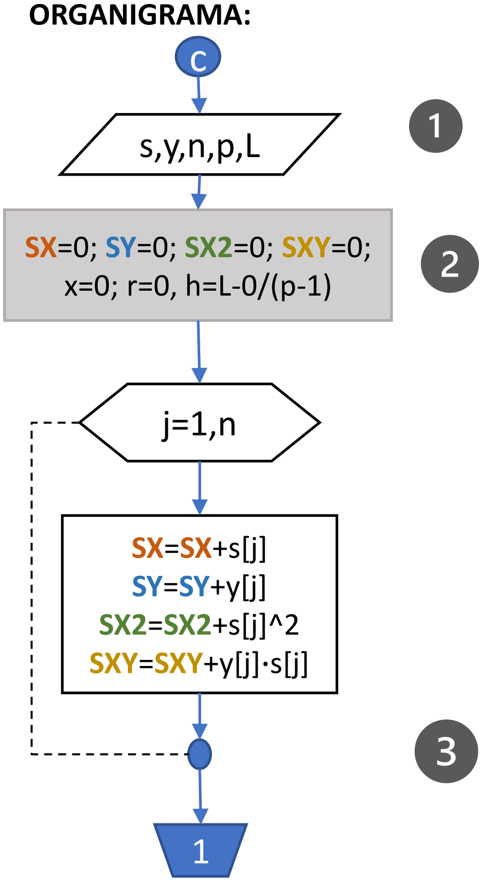
1) **CALCULAR** los coeficientes **a, b**
2) **OBTENER** los **valores** que toma la **recta de regresión en los puntos** dados por un **vector x** cuyos valores sean equidistantes (con **p componentes**) en un **intervalo [0,L]**.

RESULTADO:
- **a, b**
- Un **vector r** que contenga los valores de la recta de regresión en cada punto almacenado en el vector x

Partimos de las expresiones propuestas anteriormente correspondientes a los sumatorios, las cuales inicializaremos a 0 en el algoritmo para guardar en ellos los sumatorios:

$$\boldsymbol{SX} \equiv \sum_{j=1}^{n} s_j \qquad \boldsymbol{SY} \equiv \sum_{j=1}^{n} y_j \qquad \boldsymbol{SX2} \equiv \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 \qquad \boldsymbol{SXY} \equiv \sum_{j=1}^{n} (y_j \cdot s_j)$$

ORGANIGRAMA:



1. No metemos **x** porque son los valores a calcular

2. **Inicializamos los sumatorios** anteriores, el **vector r** y la **distancia h** entre los puntos equidistantes del intervalo [0,L]

3. **Cerramos el bucle** una vez que los sumatorios están calculados; si no, seguiría corriendo.

1

$$a = \frac{SY \cdot SX2 - SX \cdot SXY}{n \cdot SX2 - (SX)^2}$$

$$b = \frac{n \cdot SXY - SX \cdot SY}{n \cdot SX2 - (SX)^2}$$

4. **Calculamos** los **valores** de **a** y **b**, donde empleamos los sumatorios que ya hemos calculado.

i =1,p

5. Abrimos un **nuevo bucle** para **particularizar en cada punto**.

$x[i] = 0 + (i-1) \cdot h$

$\boxed{r[i] = a + b \cdot x[i]}$

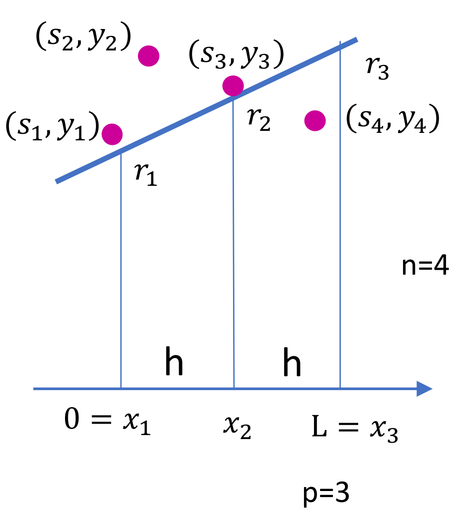
En el cálculo del vector x **ponemos 0** porque es el **extremo izquierdo del dominio del intervalo [0,L]**. Si, por ejemplo, fuera [3,L], pondríamos 3 en su lugar.

Una vez hemos calculado el valor de x, podemos usarlo en la ecuación de la recta de regresión y así **hallar $r[i]$**.

a,b,r,x

F

Boceto de representación gráfica para **n=4** y **p=3**.



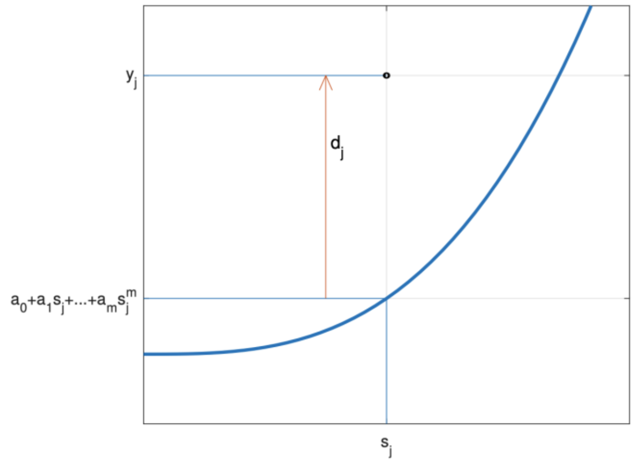
M2/2020

AJUSTE POR MÍNIMOS CUADRADOS: CASO NO LINEAL

En este caso, realizaremos el ajuste por mínimos cuadrados mediante un **polinomio de grado m** (m siendo un número natural cualquiera), es decir:

$$p(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \cdots + a_m \cdot x^m$$

n → número de puntos en la nube de puntos
m → grado del polinomio buscado (el que se ajusta a los puntos)



$$f(a_0, a_1, a_2, \ldots, a_m) = \sum_{j=1}^{n} d_j^2 = \sum_{j=1}^{n} \left[\left(y_j - p(s_j) \right)^2 \right] = \sum_{j=1}^{n} [(y_j - \sum_{k=0}^{m} a_k \cdot (s_j)^k)^2]$$

De este modo, y de forma análoga al desarrollo anterior, las **derivadas parciales** serán las siguientes (una por cada valor de a):

$$f(a_0, a_1, a_2, \ldots, a_m) = \sum_{j=1}^{n} [(y_j - (\boldsymbol{a_0 + a_1 \cdot s_j + a_2 \cdot s_j^2 + \cdots + a_m \cdot s_j^m}))^2]$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_0} = 2 \sum_{j=1}^{n} [\left(y_j - (a_0 + a_1 \cdot s_j + a_2 \cdot s_j^2 + \cdots + a_m \cdot s_j^m)\right) \cdot (-1)] = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_1} = 2 \sum_{j=1}^{n} [\left(y_j - (a_0 + a_1 \cdot s_j + a_2 \cdot s_j^2 + \cdots + a_m \cdot s_j^m)\right) \cdot (-s_j)] = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_2} = 2 \sum_{j=1}^{n} [\left(y_j - (a_0 + a_1 \cdot s_j + a_2 \cdot s_j^2 + \cdots + a_m \cdot s_j^m)\right) \cdot \left(-(s_j^2)\right)] = 0$$

…

$$\frac{\partial f}{\partial a_m} = 2 \sum_{j=1}^{n} [\left(y_j - (a_0 + a_1 \cdot s_j + a_2 \cdot s_j^2 + \cdots + a_m \cdot s_j^m)\right) \cdot \left(-(s_j^m)\right)] = 0$$

Así hasta llegar a la **expresión genérica** con el término $\boldsymbol{a_m}$.

Ahora, de forma análoga al desarrollo del caso lineal, **despejamos las componentes que no dependan de las incógnitas**:

$$\sum_{j=1}^{n}\left(a_0 + a_1 \cdot s_j + a_2.s_j^2 + \cdots + a_m \cdot s_j^m\right) = \sum_{j=1}^{n} y_j$$

$$\sum_{j=1}^{n}\left(a_0 \cdot s_j + a_1 \cdot s_j^2 + a_2.s_j^3 + \cdots + a_m \cdot s_j^{m+1}\right) = \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot s_j$$

$$\sum_{j=1}^{n}\left(a_0 \cdot s_j^2 + a_1 \cdot s_j^3 + a_2.s_j^4 + \cdots + a_m \cdot s_j^{m+2}\right) = \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot s_j^2$$

…

$$\sum_{j=1}^{n}\left(a_0 \cdot s_j^m + a_1 \cdot s_j^{m+1} + a_2.s_j^{m+2} + \cdots + a_m \cdot s_j^{2m}\right) = \sum_{j=1}^{n} y_j \cdot s_j^m$$

Así, de las expresiones anteriores, **obtendremos un sistema de ecuaciones** conformado por ***m* ecuaciones** y **m incógnitas** (por a_m):

$$n \cdot a_0 + a_1 \sum_{j=1}^{n} s_j + a_2 \sum_{j=1}^{n} s_j^2 + \cdots + a_m \sum_{j=1}^{n} s_j^m$$

$$a_0 \sum_{j=1}^{n} s_j + a_1 \sum_{j=1}^{n} s_j^2 + a_2 \sum_{j=1}^{n} s_j^3 + \cdots + a_m \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+1}$$

$$a_0 \sum_{j=1}^{n} s_j^2 + a_1 \sum_{j=1}^{n} s_j^3 + a_2 \sum_{j=1}^{n} s_j^4 + \cdots + a_m \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+2}$$

…

$$a_0 \sum_{j=1}^{n} s_j^m + a_1 \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+1} + a_2 \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+2} + \cdots + a_m \sum_{j=1}^{n} s_j^{2m}$$

Para concluir, **pasamos la expresión a forma matricial** donde encontraremos una **matriz de datos**, un **vector de incógnitas** y un **vector de resultados**:

$$S \cdot a = B \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} n & \sum_{j=1}^{n} s_j & \sum_{j=1}^{n} s_j^2 & \sum_{j=1}^{n} s_j^3 & \cdots & \sum_{j=1}^{n} s_j^m \\ \sum_{j=1}^{n} s_j & \sum_{j=1}^{n} s_j^2 & \sum_{j=1}^{n} s_j^3 & \sum_{j=1}^{n} s_j^4 & \cdots & \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+1} \\ \sum_{j=1}^{n} s_j^2 & \sum_{j=1}^{n} s_j^3 & \sum_{j=1}^{n} s_j^4 & \sum_{j=1}^{n} s_j^5 & \cdots & \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+2} \\ \sum_{j=1}^{n} s_j^3 & \sum_{j=1}^{n} s_j^4 & \sum_{j=1}^{n} s_j^5 & \sum_{j=1}^{n} s_j^6 & \cdots & \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+3} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \sum_{j=1}^{n} s_j^m & \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+1} & \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+2} & \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+3} & \cdots & \sum_{j=1}^{n} s_j^{2m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \cdots \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{n} y_j \\ \sum_{j=1}^{n} y_j s_j \\ \sum_{j=1}^{n} y_j s_j^2 \\ \sum_{j=1}^{n} y_j s_j^3 \\ \cdots \\ \sum_{j=1}^{n} y_j s_j^m \end{pmatrix}$$

Datos

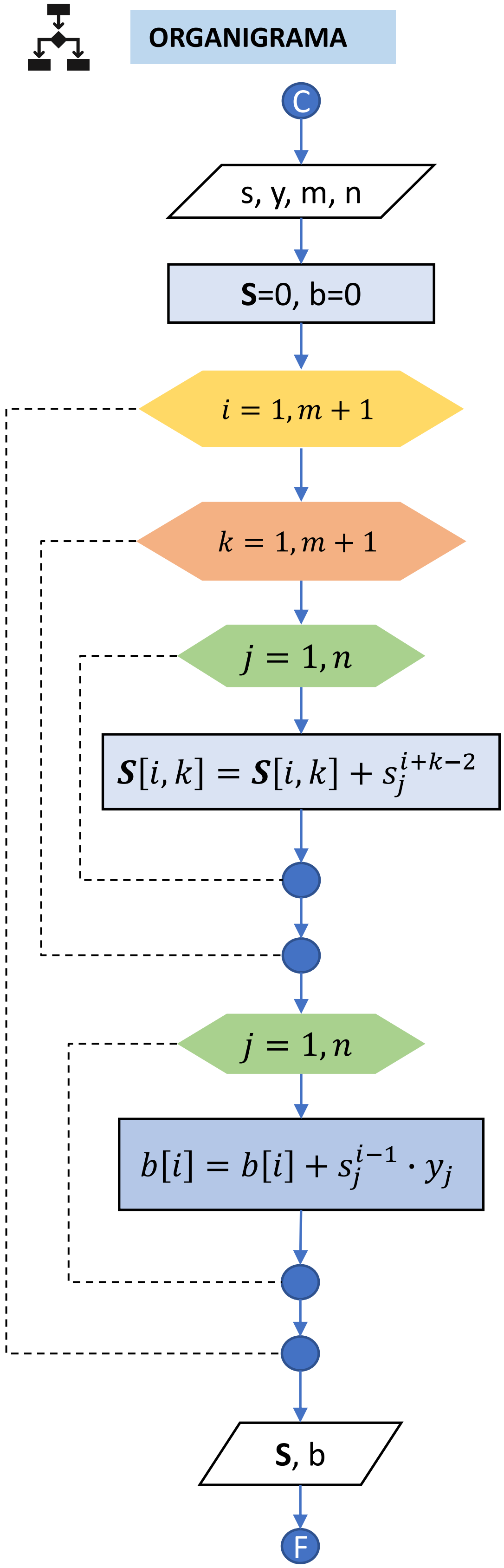
Incógnitas

Términos independientes

De esta manera, la **matriz S de datos** responde a la forma $\boldsymbol{S_{i,k} = \sum_{j=1}^{n} s_j^{i+k-2}}$ en el que $\boldsymbol{(i = 1, \dots, m+1; k = 1, \dots, m+1)}$, mientras que el **vector** $\boldsymbol{b}$ de términos independientes responde a $\boldsymbol{b_i = \sum_j^n (s_j^{i-1} \cdot y_j)}$ siendo $\boldsymbol{i = (1, \dots, m+1)}$.

EJERCICIO: Realizar un **algoritmo** para **obtener** la **matriz S** y el **vector b** vistos anteriormente, Se dan los **vectores s** e **y,** así como los **valores** de **m** y **n**.

Resolución en la siguiente página



PSEUDOCÓDIGO

Inicio del pseudocódigo
Leer s, y, m, n
Inicializar **S**=0; b=0
Para i desde 1 a m+1
    Para k desde 1 a m+1
        Para j desde 1 a n
            Hacer $\boldsymbol{S}[i,k]=\boldsymbol{S}[i,k]+s_j^{i+k-2}$
        Fin del bucle en j
    Fin del bucle en k
    Para j desde 1 a n
        Hacer $b[i]=b[i]+s_j^{i-1}\cdot y_j$
    Fin del bucle en j
Fin del bucle en i
Escribir **S**, b
Fin del pseudocódigo

M2/2020