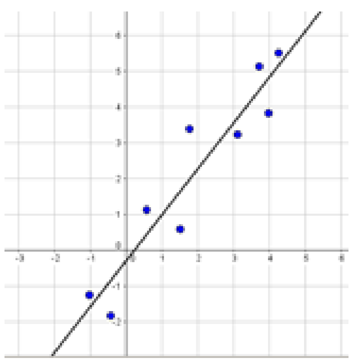
Mínimos cuadrados.

¿Qué es ajustar por mínimos cuadrados?

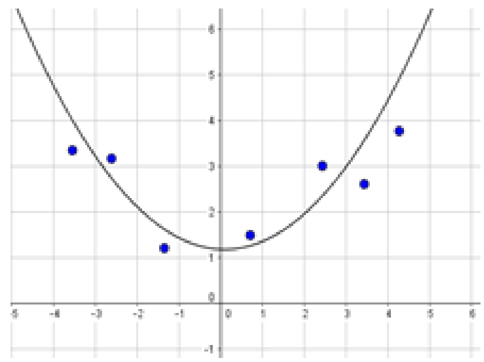
Es un método que nos permite hallar la función que mejor se ajuste a un conjunto de puntos de tal modo que la suma de los errores, es decir la distancia entre cada punto y el valor correspondiente en la recta, sea mínima.

Existen dos casos:

Caso lineal

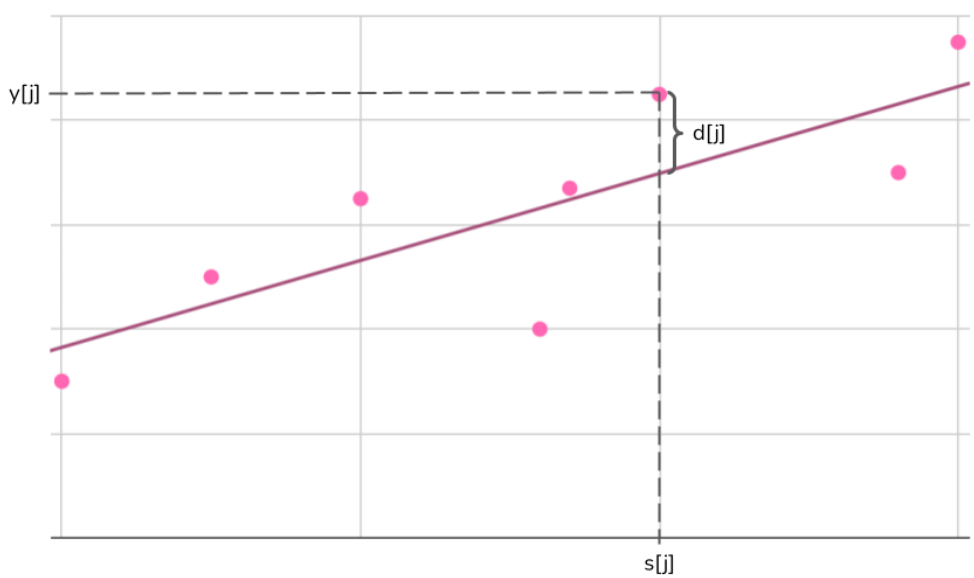


Caso no lineal



Caso lineal: para polinomios de grado 1 (rectas)

Buscamos hallar una recta y = ax + b de modo que la distancia entre la recta y cada punto sea mínima:



$$d_j = y_j - (a+b*s_j)$$

Para obtener los valores a y b para los cuales la recta esté mejor ajustada minimizaremos la suma de todas las distancias elevadas al cuadrado, es decir:

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

➔ Se elevan las distancias al cuadrado porque al ser valores muy pequeños esto nos permite “exagerar” lo pequeños que son, como ocurre por ejemplo con $0{,}1^2 = 0{,}01$

Para minimizar esta ecuación utilizaremos derivadas parciales:

- Derivamos respecto a *a* y lo igualamos a 0

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

$$2\sum_{j=1}^{n} [(y_j - (a+b*s_j))(-1)] = 0 \,; \quad \sum_{j=1}^{n} [(y_j - (a+b*s_j))(-1)] = 0;$$

$$\sum_{j=1}^{n} [y_j\,(-1)] + \sum_{j=1}^{n} [-(a+b*s_j)(-1)] = 0; \quad \sum_{j=1}^{n} (y_j) = \sum_{j=1}^{n} (a+b*s_j);$$

$$\sum_{j=1}^{n} (y_j) = \sum_{j=1}^{n} (a) + \sum_{j=1}^{n} (b*s_j); \quad \sum_{j=1}^{n} (y_j) = na + b\sum_{j=1}^{n} (s_j)$$

- Repetimos el procedimiento con *b*

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

$$2\sum_{j=1}^{n} [(y_j - (a+b*s_j))(-s_j)] = 0 \,; \quad \sum_{j=1}^{n} (y_j)(s_j) = \sum_{j=1}^{n} (a+b*s_j)(s_j);$$

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

- Resolvemos el sistema de ecuaciones:

$$a = \frac{\sum_{j=1}^{n} (y_j) * \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - \sum_{j=1}^{n} (s_j) * \sum_{j=1}^{n} (s_j y_j)}{n \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - [\sum_{j=1}^{n} (s_j)]^2}$$

$$b = \frac{n \sum_{j=1}^{n} (s_j y_j) - \sum_{j=1}^{n} (s_j) * \sum_{j=1}^{n} (y_j)}{n \sum_{j=1}^{n} (s_j)^2 - [\sum_{j=1}^{n} (s_j)]^2}$$

Caso no lineal: para polinomios de grado superior a 1

Buscamos hallar un polinomio de grado m: $y = a_0 + a_1x + a_2x^2 \dots + a_mx^m$ con m+1 componentes. Este polinomio se puede expresar como:

$$\sum_{k=0}^{m} a_k x^k$$

La función que minimizaremos, en la que *n* será el número de puntos, será por tanto:

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

- Derivamos con respecto a a_0

$$\frac{\partial f}{\partial a_0} = 2 \sum_{j=1}^{n} [(y_j - \sum_{k=1}^{m} a_k (s_j)^k)(-1)] = 0;$$

$$\sum_{j=1}^{n} (y_j) = \sum_{j=1}^{n} [\sum_{k=1}^{m} a_k (s_j)^k] = a_0 n + a_1 \sum_{j=1}^{n} s_j + a_2 \sum_{j=1}^{n} s_j^2 + \dots + a_m \sum_{j=1}^{n} s_j^m$$

- Con respecto a a_1

$$\frac{\partial f}{\partial a_1} = 2 \sum_{j=1}^{n} [(y_j - \sum_{k=1}^{m} a_k (s_j)^k)(-s_j)] = 0;$$

$$\sum_{j=1}^{n} (y_j s_j) = \sum_{j=1}^{n} [\sum_{k=1}^{m} a_k (s_j)^k](s_j) = a_0 \sum_{j=1}^{n} s_j + a_1 \sum_{j=1}^{n} s_j^2 + a_2 \sum_{j=1}^{n} s_j^3 + \dots + a_m \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+1}$$

- Con respecto a a_2

$$\frac{\partial f}{\partial a_2} = 2 \sum_{j=1}^{n} [(y_j - \sum_{k=1}^{m} a_k (s_j)^k)(-s_j)^2] = 0;$$

$$\sum_{j=1}^{n} (y_j s_j^2) = \sum_{j=1}^{n} [\sum_{k=1}^{m} a_k (s_j)^k](s_j)^2 = a_0 \sum_{j=1}^{n} s_j^2 + a_1 \sum_{j=1}^{n} s_j^3 + a_2 \sum_{j=1}^{n} s_j^4 + \ldots + a_m \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+2}$$

- Con respecto a a_m

$$\frac{\partial f}{\partial a_2} = 2 \sum_{j=1}^{n} [(y_j - \sum_{k=1}^{m} a_k (s_j)^k)(-s_j)^m] = 0;$$

$$\sum_{j=1}^{n} (y_j s_j^m) = \sum_{j=1}^{n} [\sum_{k=1}^{m} a_k (s_j)^k](s_j)^m = a_0 \sum_{j=1}^{n} s_j^m + a_1 \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+1} + a_2 \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+2} + \ldots + a_m \sum_{j=1}^{n} s_j^{m+m}$$

- Resolvemos el sistema de ecuaciones para lo que crearemos una matriz:

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