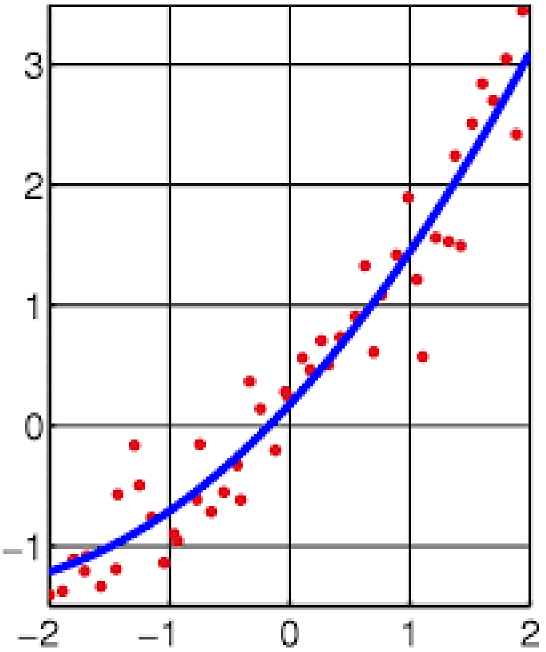
Aproximación por mínimos cuadrados (caso no lineal)

Para calcular ecuaciones no lineales



Se crea polinomio de grado m-1, $P(x)=a_1+a_2*x+a_3*x^2+...+a_m*x^{m-1}$. Esto es lo mismo que el sumatorio de a_r*x^{r-1}, siendo r el número de términos que van desde 1 hasta m.
La diferencia (d_k) que existe entre el valor que toma un punto s_k (y_k) y el polinomio es igual a $y_k-P(s_k)=y_k-\sum(a_r*(s_k)^{r-1}$; donde r varía desde 1 hasta n (nº puntos).

Al aproximar por mínimos cuadrados se busca minimizar esa diferencia d_k elevándola al cuadrado, quedando por tanto la expresión:

$$f(a_1,a_2,\ldots,a_m)=\sum_{k=1}^{n} d_k^2=\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k-p(s_k)\right)^2\right]=\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k-\sum_{r=1}^{m} a_r(s_k)^{r-1}\right)^2\right]$$

Siendo n el número de puntos de la nube.
Después se particulariza la expresión para cada a mediante las derivadas parciales, e igualándolas a cero, ya que el cuadrado de la diferencia tenía que ser mínimo.

$$\frac{\partial f}{\partial a_1} = 2\sum_{k=1}^{n}\left(y_k - (a_1 + a_2 s_k + a_3 s_k^2 + a_4 s_k^3 + \ldots + a_m s_k^{m-1})\right)(-1) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_2} = 2\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k - (a_1 + a_2 s_k + a_3 s_k^2 + a_4 s_k^3 + \ldots + a_m s_k^{m-1})\right)(-s_k)\right] = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_3} = 2\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k - (a_1 + a_2 s_k + a_3 s_k^2 + a_4 s_k^3 + \ldots + a_m s_k^{m-1})\right)\left(-\left(s_k^2\right)\right)\right] = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_4} = 2\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k - (a_1 + a_2 s_k + a_3 s_k^2 + a_4 s_k^3 + \ldots + a_m s_k^{m-1})\right)\left(-\left(s_k^3\right)\right)\right] = 0$$

$$\ldots$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_m} = 2\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k - (a_1 + a_2 s_k + a_3 s_k^2 + a_4 s_k^3 + \ldots + a_m s_k^{m-1})\right)\left(-\left(s_k^{m-1}\right)\right)\right] = 0$$

Siendo lo que está en azul la diferencia dk (yk-sumatorio de ar*skr-1, variando la r de 1 hasta m, resolviendo:

$$\sum_{k=1}^{n}(a_1 + a_2 s_k + a_3 s_k^2 + a_4 s_k^3 + \ldots + a_m s_k^{m-1}) = \sum_{k=1}^{n} y_k$$

$$\sum_{k=1}^{n}(a_1 s_k + a_2 s_k^2 + a_3 s_k^3 + a_4 s_k^4 + \ldots + a_m s_k^{m}) = \sum_{k=1}^{n}\left(s_k y_k\right)$$

$$\sum_{k=1}^{n}(a_1 s_k^2 + a_2 s_k^3 + a_3 s_k^4 + a_4 s_k^5 + \ldots + a_m s_k^{m+1}) = \sum_{k=1}^{n}\left(s_k^2 y_k\right)$$

$$\sum_{k=1}^{n}(a_1 s_k^3 + a_2 s_k^4 + a_3 s_k^5 + a_4 s_k^6 + \ldots + a_m s_k^{m+2}) = \sum_{k=1}^{n}\left(s_k^3 y_k\right)$$

$$\ldots$$

$$\sum_{k=1}^{n}(a_1 s_k^{m-1} + a_2 s_k^{m} + a_3 s_k^{m+1} + a_4 s_k^{m+2} + \ldots + a_m s_k^{2m-2}) = \sum_{k=1}^{n}\left(s_k^{m-1} y_k\right)$$

Una vez planteado este sistema, solo queda resolverlo para sacar las incógnitas (ak).

A la hora de hacer un algoritmo, se busca representarlo de forma matricial, llegando a:

$$\mathbf{A}.\mathbf{x} = \mathbf{b} \qquad = N$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^{n} s_k^0 & \sum_{k=1}^{n} s_k & \sum_{k=1}^{n} s_k^2 & \sum_{k=1}^{n} s_k^3 & \dots & \sum_{k=1}^{n} s_k^{m-1} \\ \sum_{k=1}^{n} s_k & \sum_{k=1}^{n} s_k^2 & \sum_{k=1}^{n} s_k^3 & \sum_{k=1}^{n} s_k^4 & \dots & \sum_{k=1}^{n} s_k^{m} \\ \sum_{k=1}^{n} s_k^2 & \sum_{k=1}^{n} s_k^3 & \sum_{k=1}^{n} s_k^4 & \sum_{k=1}^{n} s_k^5 & \dots & \sum_{k=1}^{n} s_k^{m+1} \\ \sum_{k=1}^{n} s_k^3 & \sum_{k=1}^{n} s_k^4 & \sum_{k=1}^{n} s_k^5 & \sum_{k=1}^{n} s_k^6 & \dots & \sum_{k=1}^{n} s_k^{m+2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{k=1}^{n} s_k^{m-1} & \sum_{k=1}^{n} s_k^{m} & \sum_{k=1}^{n} s_k^{m+1} & \sum_{k=1}^{n} s_k^{m+2} & \dots & \sum_{k=1}^{n} s_k^{2m-2} \end{pmatrix}; \mathbf{X} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ \dots \\ a_m \end{pmatrix}; \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^{n} y_k \\ \sum_{k=1}^{n} (s_k y_k) \\ \sum_{k=1}^{n} (s_k^2 y_k) \\ \sum_{k=1}^{n} (s_k^3 y_k) \\ \dots \\ \sum_{k=1}^{n} (s_k^{m-1} y_k) \end{pmatrix}$$

Donde A es la matriz que contiene los coeficientes de las ar, x el vector con las incógnitas y b el vector con los términos independientes. El primer valor de la matriz A, es n, ya que al elevar sk a 0 es 1 y sumar n veces 1 es n.

Y para configurar dichos vectores y matriz se hace por medio de estas expresiones.

$$A_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} s_k^{(i-1)+(j-1)} \Rightarrow A_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} s_k^{i+j-2}; \quad b_i = \sum_{k=1}^{n} \left(s_k^{i-1} y_k \right)$$

$$(i = 1,\dots,m; j = 1,\dots,m)$$

Ejemplo Ilustrativo

Dados los puntos (0.1,-1), (0.8,0.95), (1.2,1.8), (1.2,1.9), encontrar la parábola (polinomio de grado <=2) que aproxime los puntos por mínimos cuadrados.

Al ser de grado 2, el polinomio será: P(x)=a1+a2x+a3x^2, por tanto, el sistema generado será de tres ecuaciones y tres incógnitas (donde n es el que es el número de puntos):

$$
\begin{cases}
na_1 + a_2\sum_{j=1}^{n} s_j + a_3\sum_{j=1}^{n} s_j^2 = \sum_{j=1}^{n} y_j \\
a_1\sum_{j=1}^{n} s_j + a_2\sum_{j=1}^{n} s_j^2 + a_3\sum_{j=1}^{n} s_j^3 = \sum_{j=1}^{n} (s_j y_j) \\
a_1\sum_{j=1}^{n} s_j^2 + a_2\sum_{j=1}^{n} s_j^3 + a_3\sum_{j=1}^{n} s_j^4 = \sum_{j=1}^{n} (s_j^2 y_j)
\end{cases}
$$

Se hace una tabla para que sea más fácil de resolver, en la que se incluyan los valores dados (sj,yj) y los necesarios para resolver el sistema (sumatorios).

s_j	s_j^2	s_j^3	s_j^4	y_j	$s_j y_j$	$s_j^2 y_j$
0.1	0.01	0.001	0.0001	-1	-0.1	-0.01
0.8	0.64	0.512	0.4096	0.95	0.76	0.608
1.2	1.44	1.728	2.0736	1.8	2.16	2.592
1.2	1.44	1.728	2.0736	1.9	2.28	2.736
1.7	2.89	4.913	8.3521	2.1	3.57	6.069
2.5	6.25	15.625	39.0625	3.6	9.00	22.500
$\Sigma = 7.5$	$\Sigma =12.67$	$\Sigma =24.597$	$\Sigma =51.9715$	$\Sigma = 9.35$	$\Sigma =17.67$	$\Sigma =34.495$

Una vez obtenidos estos valores ya se puede resolver el sistema, que queda como:

a1*4+a2*7.5+a3*12.67=9.53

a1*7.5+a2*12.67+a3*24.597=17.67

a1*12.67+a2*24.597+a3*51.9715=34.495

Y al resolverlo, a1= -1.434, a2= 3.4, a3= -0.597