MÍNIMOS CUADRADOS

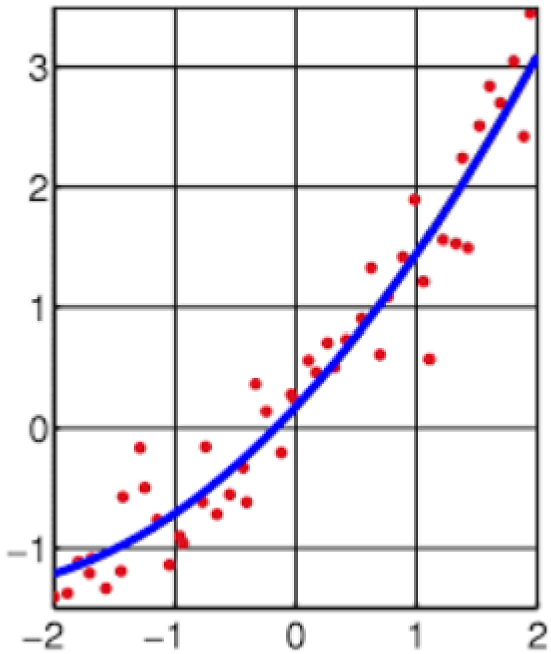
Ajuste para ecuaciones no lineales: caso no lineal

Índice

¿Qué es y en qué consiste este método?

Si no se ha tenido contacto previo con la metodología de ajuste por mínimos cuadrados recomendamos visitar primero nuestro recurso: “Mínimos cuadrados y ajuste por recta de regresión; caso lineal”, ya que esta explicación se hará a partir de la realizada en dicho recurso.

En esta ocasión, no tenemos un polinomio de primer grado, sino cualquier otro tipo de expresión no lineal, como un polinomio de segundo grado o una exponencial. Así, lo que obtendremos al aproximar nuestra nube de puntos no será una recta de regresión, sino una curva.



Operaciones

En primer lugar, crearemos un polinomio de grado m-1, tal que:

$$P(x)=a_1+a_2*x+a_3*x^2+...+a_m*x^{m-1}.$$

NOTA: esta expresión es igual al sumatorio de a_r*x^{r-1}, siendo r el número de términos desde 1 hasta m.

Similar al caso lineal, la diferencia (d_k) que existe entre el valor que toma un punto s_k (y_k) y el polinomio es igual a:

$$y_k-P(s_k)=y_k-\sum(a_r*(s_k)^{r-1}$$

Con r que varía entre 1 y n, que es el número de puntos.

Tras esto, minimizaremos la expresión elevándola al cuadrado, tal y como hicimos en el caso lineal, quedando la siguiente expresión:

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

En nuestro siguiente paso, particularizaremos nuestra expresión para cada valor de "a" mediante derivadas parciales. Tras esto la igualaremos a cero con tal de minimizarlas:

$$\frac{\partial f}{\partial a_1}=2\sum_{k=1}^{n}\left(y_k-(a_1+a_2s_k+a_3s_k^2+a_4s_k^3+...+a_ms_k^{m-1})\right)(-1)=0$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_2}=2\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k-(a_1+a_2s_k+a_3s_k^2+a_4s_k^3+...+a_ms_k^{m-1})\right)(-s_k)\right]=0$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_3}=2\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k-(a_1+a_2s_k+a_3s_k^2+a_4s_k^3+...+a_ms_k^{m-1})\right)(-(s_k^2))\right]=0$$

$$\frac{\partial f}{\partial a_4}=2\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k-(a_1+a_2s_k+a_3s_k^2+a_4s_k^3+...+a_ms_k^{m-1})\right)(-(s_k^3))\right]=0$$

...

$$\frac{\partial f}{\partial a_m}=2\sum_{k=1}^{n}\left[\left(y_k-(a_1+a_2s_k+a_3s_k^2+a_4s_k^3+...+a_ms_k^{m-1})\right)(-(s_k^{m-1}))\right]=0$$

NOTA: en azul tenemos la diferencia d_k, en forma de y_k – el sumatorio de $ar*s_k^{r-1}$.

Resolviendo cada derivada parcial obtenemos:

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

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

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

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

Por lo que de forma general queda:

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

Una vez planteado el sistema, solo quedará su resolución para obtener los valores de a_k. Como después se busca obtener un algoritmo, lo resolveremos de forma matricial, quedando:

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

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

NOTA: A se trata de la matriz de los coeficientes de las a_r; x el vector de las incógnitas; b el de los términos independientes.

NOTA: el primer valor de la matriz A, es n, ya que al elevar s_k a 0 es 1 y sumar n veces 1 es n.

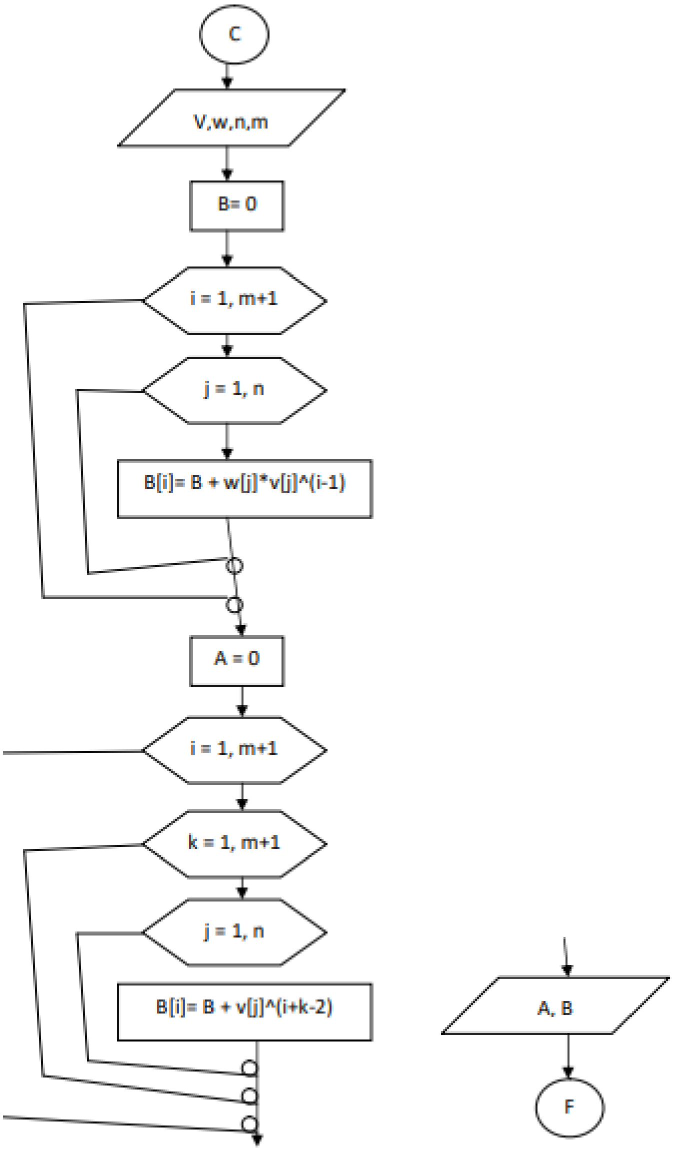
Por último, para configurar los vectores y la matriz de forma general usaremos las siguientes fórmulas:

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

Con i=1,…, m ; j=1,….m

Algoritmos

A continuación, propondremos un algoritmo para la resolución de un problema de este tipo. No obstante, puede haber otras formas distintas de realizarlo.



Ejercicio resuelto

A continuación, resolveremos un ejercicio propuesto en Moodle en años anteriores, para demostrar como realizar este método con más claridad:

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):

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

Acto seguido, realizaremos una tabla para obtener cada valor, tanto que nos dan (sj, yj) como que buscamos (los sumatorios), con mayor facilidad:

s_j	s_j^2	s_j^3	s_j^4	y_j	s_jy_j	$s_j^2y_j$
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, sustituimos y resolvemos el sistema que queda tal que:

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

Solución: a1= -1.434; a2= 3.4; a3= -0.597