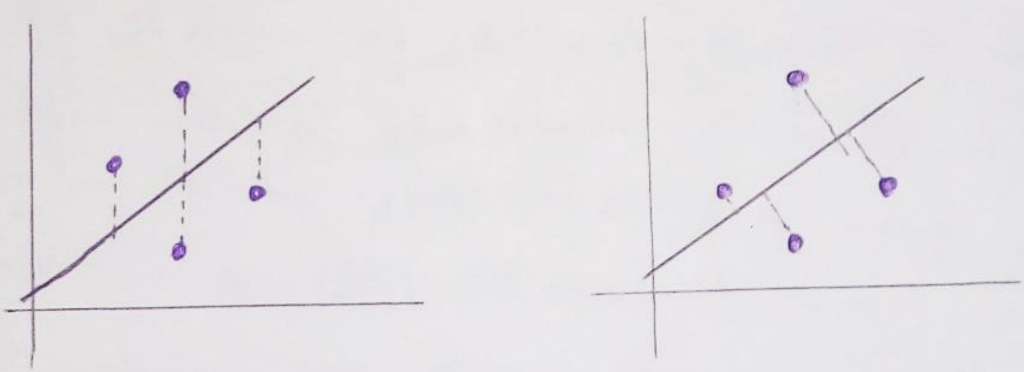
Ajuste de mínimos cuadrados

El ajuste de mínimos cuadrados es un procedimiento matemático para encontrar la curva que mejor se ajusta a un conjunto dado de puntos al minimizar la suma dee los cuadrados de los desplazamientos (residuos) de los puntos de la curva. La suma de los cuadrados de los desplazamientos se usa en lugar de los valores absolutos de desplazamiento porque esto permite que los residuos se traten como una cantidad continua diferenciable.
Sin embargo, debido a que se usan cuadrados de los desplazamientos, los puntos periféricos pueden tener un efecto desproporcionado en el ajuste, una propiedad que puede o no ser deseable según el problema en cuestión.



a) Desplazamientos verticales   b) Desplazamientos perpendiculares

En la práctica, los desplazamientos verticales de una linea (polinomio, superficie, hiperplano, etc) casi siempre se minimizan en lugar de los desplazamientos perpendiculares.
Esto proporciona una función de ajuste para la variable independiente x que estima y para una x dada (más a menudo lo que un experimentador quiere), permite incertidumbres de los

puntos de datos a lo largo de los ejes 'x' y 'y' para ser simplemente incorporados, y además proporciona una forma analítica mucho más simple para los parámetros de ajuste de la que se obtendría utilizando un ajuste basado en compensaciones perpendiculares.
Además, la técnica de ajuste se puede generalizar fácilmente desde una línea de mejor ajuste hasta un polinomio de mejor ajuste cuando se usan sumas de distancias verticales.
En cualquier caso, para un número razonable de puntos de datos 'ruidosos', la inferencia entre ajustes verticales y perpendiculares es bastante pequeña.
La técnica de ajuste lineal de mínimos cuadrados es la forma más simple y más comúnmente aplicada de regresión lineal y proporciona una solución al problema de encontrar la línea recta que mejor se ajuste a través de un conjunto de puntos.
De hecho, si la relación funcional entre las dos cantidades que se grafican se conoce dentro de constantes aditivas o multiplicativas, es una práctica común transformar los datos de tal manera que la línea resultante sea una línea recta por ejemplo trazando 'T' vs $\sqrt{l}$ en lugar de 'T' vs l en el caso de analizar el periodo T de un péndulo en función de su longitud l.
Por esta razón, las formas estándar para las leyes exponenciales, logarítmicas y de potencia a menudo se computan explícitamente.
Las fórmulas para el ajuste de mínimos cuadrados lineales fueron derivadas independientemente por Gauss y Legendre.

Para el ajuste de mínimos cuadrados no lineales a un número de parámetros desconocidos, el ajuste de mínimos cuadrados lineales se puede aplicar iterativamente a una forma linealizada de la función hasta que se logre la convergencia.
Sin embargo también es posible linealizar una función no lineal desde el principio y seguir analizando métodos lineales para determinar los parámetros de ajuste sin recurrir a procedimientos iterativos.
Este enfoque viola comúnmente la suposición implícita de que la distribución de errores es normal, pero a menudo aún da resultados aceptables usando ecuaciones normales, un pseudoinverso, etc. Dependiendo del tipo de ajuste y los parámetros iniciales elegidos, el ajuste no lineal puede ser bueno o malo en sus propiedades de convergencia.
Si se dan incertidumbres para los puntos, los puntos se pueden ponderar de forma diferente para dar más peso a los puntos de 'alta calidad'.
El ajuste de mínimos cuadrados verticales procede al encontrar la suma de los cuadrados de las desviaciones verticales R^2 de un conjunto de n puntos de datos:

$$R^2 \equiv \sum [y_i - f(x_i, a_1, a_2, a_n)]^2$$

de una función f.
Tenga en cuenta que este procedimiento no minimiza las desviaciones reales de la línea (que se medirían perpendicularmente a la función dada).
Además, aunque la suma no ajustada de distancias puede parecer una cantidad más apropiada para minimizar, el uso del valor absoluto da como resultado derivados continuos que no pueden tratarse analíticamente.

Las desviaciones cuadradas de cada punto se suman, por lo tanto, el residuo resultante se minimiza para encontrar la mejor línea de ajuste.
Este procedimiento da como resultado puntos periféricos que reciban una ponderación desproporcionadamente grande.

La condición para R^2 para ser un mínimo es que.

$$\frac{\partial(R^2)}{\partial a_i} = 0$$

para $i = 1, 2, \ldots n$. Para un ajuste lineal.

$$f(a,b) = a + bx$$

por lo tanto:

$$R^2(a,b) \equiv \sum_{i=1}^{n} [y_i - (a + bx_i)]^2$$

$$\frac{\partial(R^2)}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{n}[y_i - (a + bx_i)] = 0$$

$$\frac{\partial(R^2)}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{n}[y_i - (a + bx_i)]x_i = 0$$

Esto nos lleva a las ecuaciones

$$na + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i$$

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i + b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

En forma matricial:

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{bmatrix}$$

por lo tanto

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{bmatrix}$$

La inversa de la matriz 2x2 es:

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \frac{1}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \begin{bmatrix} \sum y_i \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i y_i \\ n\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i \end{bmatrix}$$

por lo tanto:

$$a = \frac{\sum y_i \sum x_i^2 - \sum x_i \sum x_i y_i}{n\sum x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

$$* \; n\bar{x}^2 = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2$$

$$b = \frac{n\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$b = \frac{(\sum x_i y_i) - n\bar{x}\bar{y}}{\sum x_i^2 - n\bar{x}^2}$$