Ajuste lineal y cuadrático

Objetivos

1. Simplificar el sistema de ecuaciones que resulta de mínimos cuadrados para una recta y una función cuadrática con algunos datos propuestos por el alumno agregándoles una variación aleatoria (ruido aleatorio en los datos).
2. Programar el método de mínimos cuadrados para una recta y una función cuadrática.
3. Programar el método de elemento finito para el ajuste de los mismos datos
   que fueron usados en el problema de mínimos cuadrados.

Ajuste Lineal y Cuadrático

Dado un conjunto de N puntos $\{(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)\}$ podemos aproximar la relación de dependencia entres las variables dependientes Y y las independientes X buscando entre una familia de funciones aquella que mejor se aproxime a los datos usando el criterio del Mínimo Error Cuadrático.

Ajuste lineal

Sea la familia de funciones de la forma $y(x) = ax + b$, para algún punto $(x_i,\ y_i)$, podemos decir que la mejor aproximación para el valor y_i está dado por

$$y_i = ax + b + \epsilon \tag{1}$$

dónde ϵ es un término de error asociado a la aproximación. Usando el error cuadrático medio el error asociado para todos los puntos está dado por:

$$E(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i + b))^2 \tag{2}$$

con a y b por determinar al minimizar dicha ecuación.

$$\underset{a,b}{\operatorname{argmin}}\, E(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i + b))^2 \tag{3}$$

Derivando con respecto a a y b e igualando a cero tenemos

$$\frac{\delta E(x)}{\delta a} = \sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i + b))(-x_i) = \sum_{i=1}^{N} ax_i^2 + bx_i - y_i x_i = 0 \tag{4}$$

$$\frac{\delta E(x)}{\delta b} = \sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i + b))(-1) = \sum_{i=1}^{N} ax_i + b - y_i = 0 \tag{5}$$

formando así el siguiente sistema de ecuaciones

$$\sum_{i=1}^{N} y_i x_i = a \sum_{i=1}^{N} x_i^2 + b \sum_{i=1}^{N} x_i \tag{6}$$

$$\sum_{i=1}^{N} y_i = a \sum_{i=1}^{N} x_i + Nb \tag{7}$$

Multiplicando (6) por N y (7) por $\sum_{i=1}^{N} x_i$ tenemos

$$N \sum_{i=1}^{N} y_i x_i = Na \sum_{i=1}^{N} x_i^2 + Nb \sum_{i=1}^{N} x_i \tag{8}$$

$$\sum_{i=1}^{N} y_i \sum_{i=1}^{N} x_i = a \sum_{i=1}^{N} x_i \sum_{i=1}^{N} x_i + Nb \sum_{i=1}^{N} x_i \tag{9}$$

Al restar (8) a (9)

$$\sum_{i=1}^{N} y_i \sum_{i=1}^{N} x_i - N \sum_{i=1}^{N} y_i x_i = a \sum_{i=1}^{N} x_i \sum_{i=1}^{N} x_i - Na \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \tag{10}$$

así

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i \sum_{i=1}^{N} x_i - N \sum_{i=1}^{N} y_i x_i}{\sum_{i=1}^{N} x_i \sum_{i=1}^{N} x_i - N \sum_{i=1}^{N} x_i^2} \tag{11}$$

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i - a \sum_{i=1}^{N} x_i}{N} \tag{12}$$

Ejemplo 1

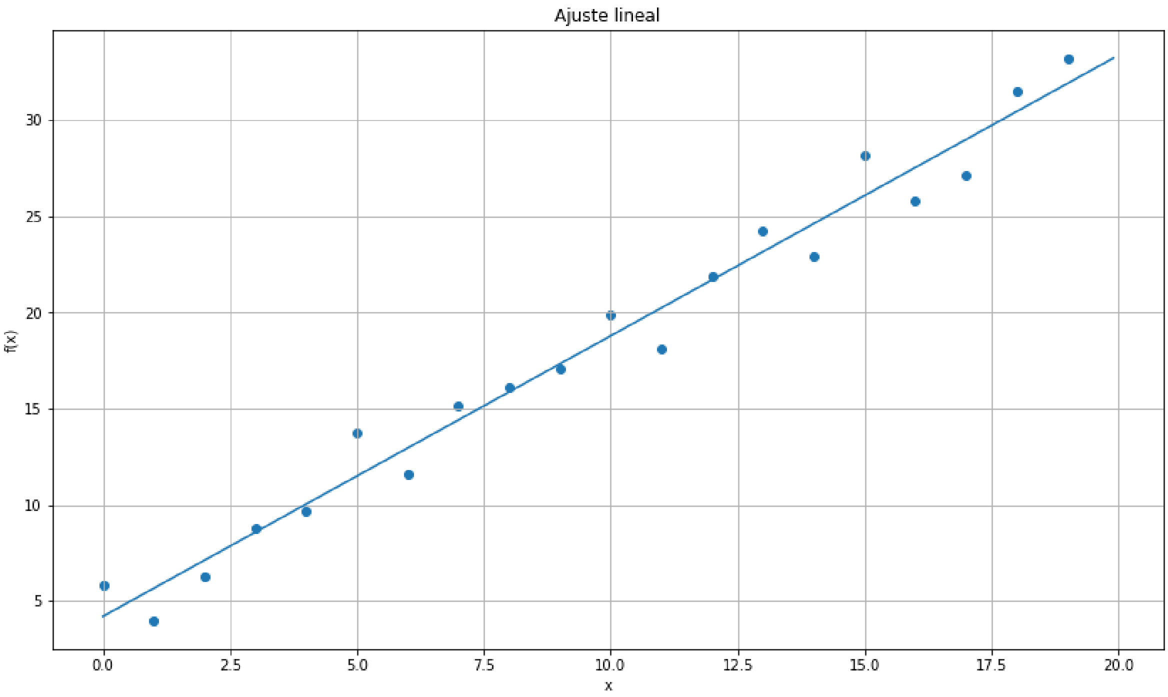
Para los siguientes puntos:

X	Y
0	5.851270431488667
1	3.977070700693263
2	6.275571224901953
3	8.755224580136968
4	9.654372215621411
5	13.734421164235536
6	11.623833724788541
7	15.161131353290383
8	16.08407104092599
9	17.044363317572248
10	19.87796713204776
11	18.112359742694984
12	21.89285648438351
13	24.262557763168626
14	22.909369246517766
15	28.20193183412269
16	25.833468914872995
17	27.13164388290091
18	31.484319854817386
19	33.19240349593878

$$a = \frac{190 * 361.06020810512035 - 20 * 4399.876418225732}{190 * 190 - 20 * 2470} = 1.4583525431986295 \tag{13}$$

$$b = frac 361.06020810512035 - 1.4583525431986295 * 19020 = 4.198661244869038 \tag{14}$$

La siguiente gráfica muestra los puntos y la recta $y(x) = 1.4583525431986295x + 4.198661244869038$



Ajuste cuadrático

Sea la familia de funciones de la forma $y(x) = ax^2 + bx + c$, para algún punto $(x_i,\ y_i)$, podemos decir que la mejor aproximación para el valor y_i está dado por

$$y_i = ax^2 + bx + c + \epsilon \tag{15}$$

dónde ϵ es un término de error asociado a la aproximación. El error de aproximación usando el error cuadrático medio el error para todos los puntos está dado por:

$$E(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i^2 + bx_i + c))^2 \tag{16}$$

con a, b y c por determinar al minimizar dicha ecuación.

$$\underset{a,b}{\operatorname{argmin}}\ E(x) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i^2 + bx_i + c))^2 \tag{17}$$

Derivando con respecto a a y b e igualando a cero tenemos

$$\frac{\delta E(x)}{\delta a} = \sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i^2 + bx_i + c))(-x_i^2) = \sum_{i=1}^{N} ax_i^4 + bx_i^3 + cx_i^2 - y_i x_i^2 = 0 \tag{18}$$

$$\frac{\delta E(x)}{\delta b} = \sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i^2 + bx_i + c))(-x_i) = \sum_{i=1}^{N} ax_i^3 + bx_i^2 + cx_i - y_i x_i = 0 \tag{19}$$

$$\frac{\delta E(x)}{\delta c} = \sum_{i=1}^{N}(y_i - (ax_i^2 + bx_i + c))(-1) = \sum_{i=1}^{N} ax_i^2 + bx_i + c - y_i = 0 \tag{20}$$

formando así el siguiente sistema de ecuaciones

$$\sum_{i=1}^{N} y_i x_i^2 = a\sum_{i=1}^{N} x_i^4 + b\sum_{i=1}^{N} x_i^3 + c\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \tag{21}$$

$$\sum_{i=1}^{N} y_i x_i = a\sum_{i=1}^{N} x_i^3 + b\sum_{i=1}^{N} x_i^2 + c\sum_{i=1}^{N} x_i \tag{22}$$

$$\sum_{i=1}^{N} y_i = a\sum_{i=1}^{N} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{N} x_i + cN \tag{23}$$

Al resolver el sistema obtenemos que:

$$a = \frac{\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^{N} x_i)^2}{n}\right]\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^2 y_i - \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \sum_{i=1}^{N} y_i}{n}\right] - \left[\sum_{i=1}^{N} x_i^3 - \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \sum_{i=1}^{N} x_i}{n}\right]\left[\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i \sum_{i=1}^{N} y_i}{n}\right]}{\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^{N} x_i)^2}{n}\right]\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^4 - \frac{(\sum_{i=1}^{N} x_i^2)^2}{n}\right]\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^3 - \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \sum_{i=1}^{N} x_i}{n}\right]^2} \tag{24}$$

$$b = \frac{\left[\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i \sum_{i=1}^{N} y_i}{n}\right]\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^4 - \frac{(\sum_{i=1}^{N} x_i^2)^2}{n}\right] - \left[\sum_{i=1}^{N} x_i^2 y_i - \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \sum_{i=1}^{N} y_i}{n}\right]\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^3 - \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \sum_{i=1}^{N} x_i}{n}\right]}{\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \frac{(\sum_{i=1}^{N} x_i)^2}{n}\right]\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^4 - \frac{(\sum_{i=1}^{N} x_i^2)^2}{n}\right]\left[\sum_{i=1}^{N} x_i^3 - \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \sum_{i=1}^{N} x_i}{n}\right]^2} \tag{25}$$

$$c = \frac{\sum_{i=1}^{N} y_i - b\sum_{i=1}^{N} x_i - a\sum_{i=1}^{N} x_i^2}{n} \tag{26}$$

Ejemplo 2

Para los siguientes puntos:

X	Y
0	21.68092485865163
1	95.24085164367884
2	63.27330608779468
3	42.517182541694325
4	120.38879198545152
5	82.43998090910213
6	130.8267761915788
7	164.90863402077002
8	135.8092362294662
9	170.45963413177114
10	199.86174204499977
11	205.72486233870225
12	254.5673575021346
13	280.8528672486854
14	329.7955313204143
15	369.11625761111645
16	407.1148502065699
17	510.7488486677496
18	604.1051410300815
19	600.1936983620915

Sustituyendo en las ecuaciones (24), (25) y (26) tenemos que

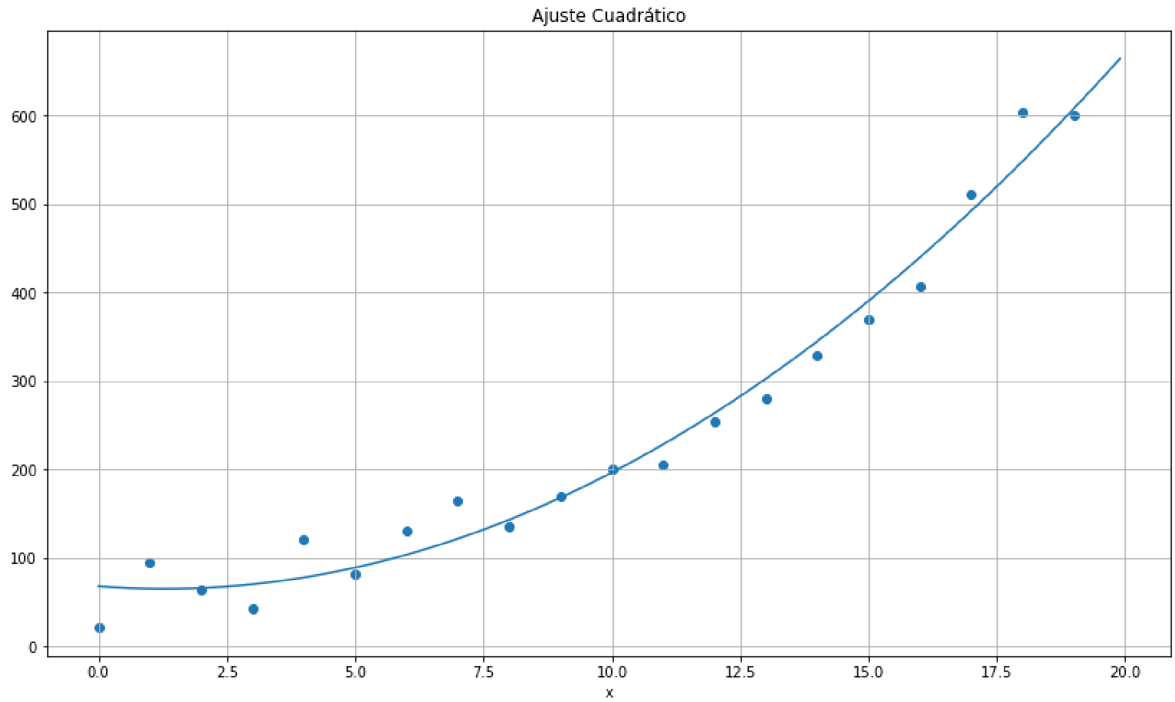
$$a = 1.7295330104458295 \tag{27}$$

$$b = -4.444461220193719 \tag{28}$$

$$c = 68.10637854840562 \tag{29}$$

La siguiente figura muestra los puntos y el ajuste con la recta:

$y(x) = 1.7295330104458295x^2 - 4.444461220193719x + 68.10637854840562$



Ajuste Mediante Elementos finitos

Con los mismos número de puntos ($m = 20$) del *Ejemplo 2* se define una partición del tamaño n en un intervalo $[a, b]$ que los contenga, tal que:

$$a = z_0 < z_1 < \ldots < z_{n-1} < z_n = b,\ z_j = a + jh,\ h = \frac{b-a}{n} \tag{30}$$

Dónde se definen la familia de funciones lineales a pedazos $N_j(x)$ con $j = 0, 1, \ldots, n$ que cumplen con:

$$\begin{aligned} N_j(x_k) &= 1,\ j = k \\ N_j(x_k) &= 0,\ j \neq k \end{aligned} \tag{31}$$

Con dichas funciones se define:

$$\Phi(x) = \sum_{j=1}^{n} \phi_j N_j(x) \tag{32}$$

dónde ϕ_j son parámetros a identificar resolviendo el problema de minimización

$$\min_{\phi_0,\phi_1,\phi_2,\ldots,\phi_n} \sum_{j=1}^{m} \Big[\phi_j(x_i) - y_i\Big]^2 + \lambda \int_a^b (\Phi'(x))^2 dx \tag{33}$$

Al derivar y sustituyendo se obtiene el sistema de ecuaciones para un elemento k:

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m} N_k^2(xi) + \lambda/h & \sum_{i=1}^{m} N_{k+1}(xi)N_k(x_i)\ \lambda/h \\ \sum_{i=1}^{m} N_{k+1}(xi)N_k(x_i)\ \lambda/h & \sum_{i=1}^{m} N_{k+1}^2(xi) + \lambda/h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_k \\ \phi_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{m} y_i N_k(xi) \\ \sum_{i=1}^{m} y_i N_{k+1}(xi) \end{pmatrix} \tag{34}$$

Reescribiendo tenemos

$$\begin{pmatrix} a_k & b_k \\ b_k & c_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_k \\ \phi_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_k \\ t_k \end{pmatrix} \tag{35}$$

Y al armar el sistema global obtenemos

$$\begin{pmatrix} a_0 & b_0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b_0 & c_0+a_1 & b_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & b_1 & c_1+a_2 & b2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_2 & c_2+a_3 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & b_{k-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & c_{k-2}+a_{k-1} & b_{k-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{k-1} & c_{k-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_0 \\ t_0+s_1 \\ t_1+s_2 \\ t_2+s_3 \\ \vdots \\ t_{n-2}+s_{n-1} \\ t_{n-1} \end{pmatrix} \tag{36}$$

dónde

$$N_k(x) = 1 - \frac{1}{h}(x - z_k) \tag{37}$$

$$N_{k+1}(x) = \frac{1}{h}(x - z_k) \tag{39}$$

Ejemplo 3

Para los siguientes puntos puntos

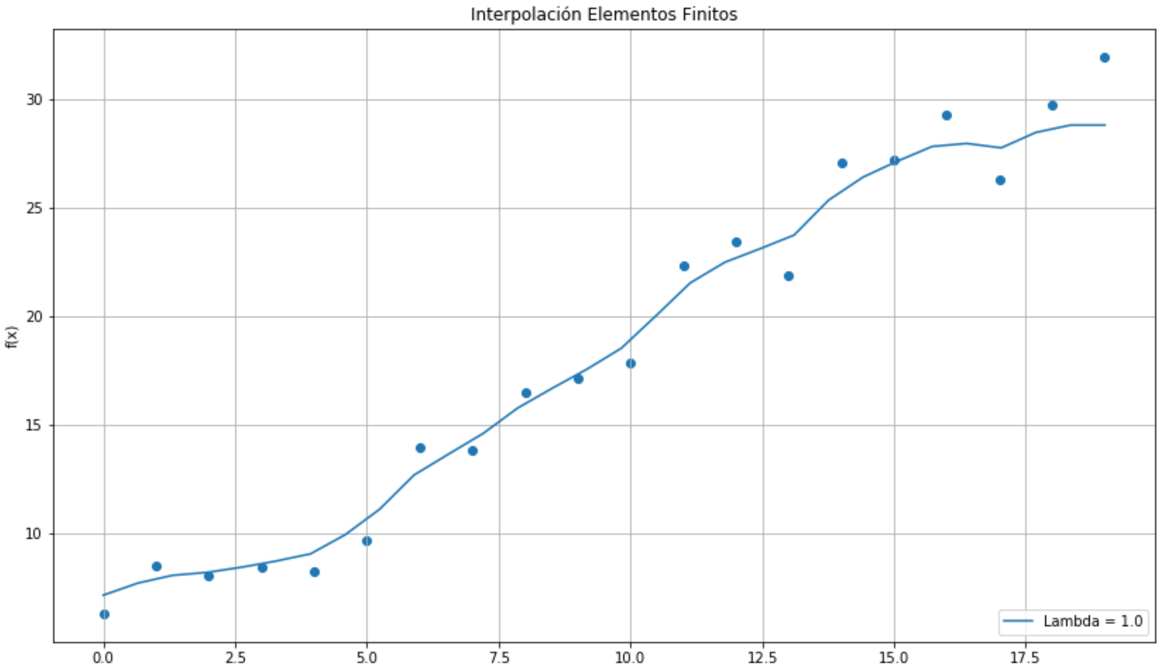
x	y
0	6.309171999259924
1	8.544205392655769
2	8.051562494152101
3	8.472655294900648
4	8.23060801511212
5	9.704466004603786
6	13.96878118401138
7	13.8169990631032
8	16.47903768141736
9	17.139132828985943
10	17.849416819022576
11	22.343076550999047
12	23.44494685527433
13	21.880714758508407
14	27.069771655575096
15	27.19058082929457
16	29.300986914470027
17	26.308455527794038
18	29.71993048199846
19	31.964956230774753

los valores de $\{z_k\}$ y $\{\phi_k\}$ son:

```
z = [0.0, 0.6551724137931034, 1.3103448275862069, 1.9655172413793103,
2.6206896551724137, 3.275862068965517, 3.9310344827586206,
4.586206896551724, 5.241379310344827, 5.896551724137931, 6.551724137931034,
7.206896551724138, 7.862068965517241, 8.517241379310345, 9.172413793103448,
9.827586206896552, 10.482758620689655, 11.137931034482758,
11.793103448275861, 12.448275862068964, 13.103448275862068,
13.758620689655173, 14.413793103448276, 15.068965517241379,
15.724137931034482, 16.379310344827587, 17.03448275862069,
17.689655172413794, 18.344827586206897, 19.0]
```

```
phi = [ 7.15802234  7.71416567  8.07099469  8.20636338  8.44563176
 8.72837427 9.06295695  9.93955996 11.11602983 12.69724213 13.66086063
14.61085821 15.78224126 16.69231272 17.56675362 18.53654166 20.02745312
21.55098567 22.49891413 23.10914351 23.74607662 25.35668888 26.42063853
27.15810849 27.83103664 27.96832346 27.76670328 28.4767889  28.81314525
28.81314525]
```

La gráfica correspondiente a la interpolación es la siguiente:



Conclusiones

Las 3 métodos de ajuste obtienen muy buenos resultados, sin embargo cabe mencionar que los primeros pueden ser usados cuando tenemos más de una observación (y_i) para algún valor en específico. Además, mientras más compleja sea la nube de puntos se podría requerir resolver el problema con otra familia de funciones, lo que implica a formular un nuevo sistema de ecuaciones.

Usando el método ajuste por elemento finito, para ajustar los valores a una serie de valores de puntos más complejos basta con jugar con los parámetros λ y el tamaño de la partición.